

(19) 世界知的所有権機関 国際事務局



] [20] | [2] | [3] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] | [4] |

(43) 国際公開日 2003 年12 月31 日 (31.12.2003)

PCT

(10) 国際公開番号 WO 2004/000841 A1

(51) 国際特許分類7: C07D 471/04, A61K 31/437, 31/445, 31/4453, 31/4545, 31/496, 31/519, 31/5377, 31/55, A61P 3/10, 9/10, 13/12, 25/00, 43/00, C07D 487/04

(21) 国際出願番号:

PCT/JP2003/008045

(22) 国際出願日:

2003年6月25日(25.06.2003)

(25) 国際出願の言語:

日本語

(26) 国際公開の言語:

日本語

(30) 優先権データ:

特願2002-185281 2002年6月25日(25.06.2002) JF

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 協和 酸酵工業株式会社 (KYOWA HAKKO KOGYO CO., LTD.) [JP/JP]; 〒100-8185 東京都千代田区 大手町一 丁目 6番 1 号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 町井 大祐 (MACHII,Daisuke) [JP/JP]; 〒411-8731 静岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和醱酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP). 鈴木 公二 (SUZUKI,Koji) [JP/JP]; 〒590-8554 大阪府 堺市 高須町一丁 1 番 5 3 号 協和醱酵工業株式会社 堺研究所内 Osaka (JP). 松村 務 (MATSUMURA,Tsutomu) [JP/JP]; 〒590-8554 大阪府 堺市 高須町一丁 1 番 5 3 号 協和醱酵工業株式会社 堺研究所内 Osaka (JP). 新井仁 (ARAI,Hitoshi) [JP/JP]; 〒411-8731 静岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和醱酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP). 岩瀬 美穂 (IWASE,Miho) [JP/JP]; 〒411-8731 静岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和醱酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP). 矢野 浩史 (YANO,Hiroshi) [JP/JP]; 〒411-8731 静

岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和醱酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP). 中西 聡(NAKANISHI,Satoshi) [JP/JP]; 〒100-8185 東京都千代田区 大手町一丁目 6 番 1 号 協和醱酵工業株式会社 本社内 Tokyo (JP). 荻野 史子 (OGINO,Fumiko) [JP/JP]; 〒305-0841 茨城県 つくば市 御幸が丘 2 番地協和醱酵工業株式会社 筑波研究所内 Ibaraki (JP). 高崎浩太郎(TAKASAKI,Kotaro) [JP/JP]; 〒411-8731 静岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和醱酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP). 日下 英昭(KUSAKA,Hideaki) [JP/JP]; 〒411-8731 静岡県 駿東郡 長泉町下土狩 1 1 8 8 協和廢酵工業株式会社 医薬総合研究所内 Shizuoka (JP).

- (81) 指定国 (国内): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (広域): ARIPO 特許 (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ特許 (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI 特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告書

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

(54) Title: HETERO-BICYCLIC COMPOUNDS

(54) 発明の名称: 二環性複素環化合物

$$R^{3} \xrightarrow{N} R^{4} X \times Z$$
 (I)

(57) Abstract: Compounds represented by the general formula (I) or pharmacologically acceptable salts thereof: (I) wherein $X \cdot Y \cdot Z$ is R^5N -C=O (wherein R^5 is hydrogen, substituted or unsubstituted lower alkyl, substituted or unsubstituted aralkyl, substituted or unsubstituted lower alkenyl, or substituted or unsubstituted lower alkynyl) or the like; R^1 and R^2 are each independently hydrogen, substituted or unsubstituted lower alkyl, or the like; and R^3 and R^4 are each independently hydrogen, substituted or unsubstituted lower alkyl, or the like.

(57) 要約:

式 (I)

$$\begin{array}{c|c}
R^3 & R^2 \\
R^4 & X & Z
\end{array}$$

{式中、 $X\cdots Y\cdots Z$ は R^5N -C=0 (式中、 R^5 は水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニルまたは置換もしくは非置換の低級アルキニルを表す) 等を表し、 R^1 および R^2 は同一または異なって、水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル等を表し、 R^3 および R^4 は同一または異なって水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル等を表す} で表される化合物またはその薬理学的に許容される塩を提供する。

明細書

二環性複素環化合物

技術 分野

本発明は、グルコース濃度依存的なインスリン分泌促進作用または好適な血糖 降下作用を有し、糖尿病治療剤として有用な二環性複素環化合物またはその薬理 学的に許容される塩に関する。

背景技術

糖尿病は、インスリンの分泌不足またはその標的細胞側の感受性低下等に基づく糖代謝を中心とした代謝異常に起因し、高血糖をきたすことが大きな特徴である。高血糖が長期間持続すると、血管障害を主要因として、網膜症、腎症、神経障害等、種々の臓器や神経に深刻な合併症が生じる。従って、糖尿病の治療では血糖値をコントロールして正常値に維持することが極めて重要であり、そのための手段が古くから研究されている。

糖尿病のうち、発症が緩徐で生命維持に必ずしもインスリン治療を必要としない病型(インスリン非依存性糖尿病:NIDDM)では、運動療法と薬物の組み合わせにより血糖値をコントロールすることができる。薬物としては、経口血糖低下剤の一種であるインスリン分泌促進剤が臨床で広く用いられている。しかしながら、現在利用可能なインスリン分泌促進剤は、いずれも血糖値に非依存的にインスリン分泌を促進するため、用量を誤ると重篤な低血糖を引き起こしたり、あるいは十分に血糖をコントロールできないという問題があり、必ずしも満足できるものではない。血糖値に応じてインスリン分泌を促進できる血糖低下剤が提供できれば、過量による低血糖の危険性を回避でき、糖尿病患者の血糖管理に極めて有用であることが期待される。

一方、特開平 3-204880 号、ジャーナル・オブ・メディシナル・ケミストリー (J. Med. Chem.) 、35 巻、3578 頁 (1992 年) 、ジャーナル・オブ・メディシナル・ケミストリー (J. Med. Chem.) 、36 巻、2508 頁 (1993 年) 、国際公開 W098/15555 号および国際公開 W000/1388 号に、2,3-ジヒドロイミダゾ[1,2-c]ピリミジン部分構造または 2,3-ジヒドロイミダゾ[1,2-α]ピリジン部分構造を含む化合物が利尿作用、抗喘息作用、抗痴呆作用、気管支拡張作用、抗アレルギー作用、抗潰瘍作用または血糖降下作用を有することが開示されている。



また、国際公開 W001/47931 号には、縮合プリン誘導体がインスリン分泌促進作用および血糖降下作用を有することが開示されている。

発明の開示

本発明の課題は、糖尿病や糖尿病合併症の予防および/または治療に有用な化合物を提供することにある。

すなわち本発明は、以下の(1)~(24)に関する。

(1) 式(I)

$$R^3 \xrightarrow[R^4]{R^1 \atop N} (I)$$

【式中、X…Y…Z は R⁵N-C=O (式中、R⁵ は水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニルまたは置換もしくは非置換の低級アルキニルを表す)、N=C-NR⁶R¹ [式中、R⁶ および R¹ は同一または異なって、水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルキール、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換のアリールまたは置換もしくは非置換の複素環基を表すか、または R⁶ と R¹ が隣接する窒素原子と一緒になって

(式中、nは1~3の整数を表し、Wは-CH₂-、-CH=CH-、-NH-、硫黄原子または酸素原子を表し、R⁸ および R⁹ は同一または異なって水素原子、置換もしくは非置換の医級アルキル、置換もしくは非置換のアラルキル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換の複素環基、置換もしくは非置換の低級アルコキシカルボニル、置換もしくは非置換の低級アルカノイル、置換もしくは非置換のアロイル、置換もしくは非置換のヘテロアロイル、ハロゲン、アミノ、ニトロ、シアノ、ヒドロキシ、オキソ、カルボキシ、カルバモイル、置換もしくは非置換のモノま



たはジ低級アルキルアミノ、置換もしくは非置換の低級アルカノイルアミノ、置 換もしくは非置換の低級アルコキシ、置換もしくは非置換のアラルキルオキシま たは置換もしくは非置換の低級アルカノイルオキシを表す)を表す]または C=C- $NR^{6a}R^{7a}$ (式中、 R^{6a} および R^{7a} はそれぞれ前記 R^6 および R^7 と同義である)を表し、 R^1 および R² は同一または異なって、水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、 置換もしくは非置換のアラルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換 もしくは非置換の低級アルキニル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしく は非置換の複素環基、ハロゲン、カルボキシ、置換もしくは非置換の低級アルコ キシカルボニルまたは C(=0)-NR^{6b}R^{7b} (式中、R^{6b} および R^{7b} はそれぞれ前記 R⁶ およ び R^7 と同義である) を表し、 R^3 および R^4 は同一または異なって水素原子、置換も しくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もし くは非置換のアラルキルまたは置換もしくは非置換の複素環基を表すか、また はR³とR⁴が隣接する窒素原子と一緒になって

$$N = R^{8a}$$

$$N = R^{9a}$$

$$W^{a}$$

$$N = R^{9a}$$

$$N = R^{9a}$$

(式中、na、W^a、R^{8a}および R^{9a}はそれぞれ前記 n、W、R⁸および R⁹と同義である)を 表す〉で表される化合物またはその薬理学的に許容される塩。

- X…Y…Z が R⁵N-C=0 (式中、R⁵ は前記と同義である) である上記 (1) 記 載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- X…Y…Z が N=C-NR⁶R⁷ (式中、R⁶ および R⁷ はそれぞれ前記と同義である) である上記(1)記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- R^6 および R^7 が同時に水素原子ではない上記 (3) 記載の化合物またはそ (4) の薬理学的に許容される塩。
- (5) R⁶ が水素原子であり、かつ R⁷ が置換もしくは非置換のピロリジニルであ る上記(3)記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- X…Y…Z が C=C-NR^{6a}R^{7a} (式中、R^{6a} および R^{7a} はそれぞれ前記と同義であ (6) る)である上記(1)記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- R^{6a} および R^{7a} が同時に水素原子ではない上記 (6) 記載の化合物またはそ (7)





の薬理学的に許容される塩。

- (8) R^1 および R^2 の一方が水素原子であり、他方が置換もしくは非置換の低級アルキルまたは置換もしくは非置換のアラルキルであるか、あるいは R^1 および R^2 が同一または異なって置換もしくは非置換の低級アルキルである上記 (1) \sim
 - (7)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- (9) R^1 が水素原子であり、かつ R^2 がアラルキルである上記 (1) \sim (7) のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
 - (10) R³が水素原子であり、かつ R⁴が低級アルキルである上記 (1) ~
 - (9) のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- (11) R^3 が水素原子であり、かつ R^4 が置換もしくは非置換のアラルキルである上記(1)~(9)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- (12) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩を含有することを特徴とする医薬。
- (13) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩を含有することを特徴とする糖尿病の予防および/または治療剤。
- (14) 上記(1) \sim (11) のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩を含有することを特徴とする糖尿病合併症の予防および/または 治療剤。
- (15) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩を含有することを特徴とするインスリン分泌促進剤。
- (16) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩を含有することを特徴とする血糖降下剤。
- (17) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする糖尿病の予防および/または治療方法。
- (18) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする糖尿病合併症の予防および /または治療方法。

!! . -



- (19) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩の有効量を投与することを特徴とするインスリン分泌促進方法。
- (20) 上記(1)~(11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的 に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする血糖降下方法。
 - (21) 糖尿病の予防および/または治療剤を製造するための上記 (1) \sim (11) のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。
- (22) 糖尿病合併症の予防および/または治療剤を製造するための上記 $(1) \sim (11)$ のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。
- (23) インスリン分泌促進剤を製造するための上記(1) \sim (11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。
- (24) 血糖降下剤を製造するための上記(1) \sim (11)のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。

以下、式(I)で表される化合物を化合物(I)という。他の式番号の化合物についても同様である。

式(I)の各基の定義において用いられる用語の意味は、以下の通りである。

低級アルキル、低級アルコキシ、低級アルコキシカルボニル、モノまたはジ低級アルキルアミノ、低級アルカノイル、低級アルカノイルオキシおよび低級アルカノイルアミノにおける低級アルキル部分としては、例えば炭素数 1~10 の、直鎖状、分枝鎖状、環状およびこれらの組み合わせからなるアルキル、より具体的には、メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、シクロプロピルメチル、ブチル、sec-プチル、tert-ブチル、シクロブチル、ペンチル、ネオペンチル、シクロペンチル、ヘキシル、シクロヘキシル、シクロヘキシルメチル、ヘプチル、シクロヘプチル、ヘナチル、シクロヘナシル、ブチル、ジクロヘナシル、ブラル、ボシル等が挙げられる。ジ低級アルキルアミノにおける 2 個の低級アルキル部分は同一でも異なっていてもよい。

低級アルケニルとしては、例えば炭素数 3~10 の、直鎖状、分枝鎖状、環状およびこれらの組み合わせからなるアルケニル、より具体的にはアリル、2-ブテニル、3-ブテニル、4-ペンテニル、2-(1-シクロヘキセニル)エチル、6-オクテニル、



2,6-オクタジエニル、デセニル等が挙げられる。

低級アルキニルとしては、例えば炭素数 3~6 の、直鎖状および分枝鎖状のアルキニル、より具体的にはプロパルギル、3-ブチニル、5-ヘキシニル等が挙げられる。

アリールおよびアロイルにおけるアリール部分としては、例えば、5~14 員環の 単環性、2 環性または 3 環性アリール、より具体的にはフェニル、ナフチル、イン デニル、アントラニル等が挙げられる。

アラルキルおよびアラルキルオキシにおけるアラルキル部分としては、例えば 炭素数 7~13 のアラルキル、より具体的にはベンジル、フェネチル、フェニルプロピル、ベンズヒドリル、ナフチルメチル等が挙げられる。さらに、分枝鎖状アルキルの二箇所でアリールと結合した二環性構造のものも包含され、それらの具体例としてはインダニル、1,2,3,4-テトラヒドロナフチル、6,7,8,9-テトラヒドロ-5分でングシクロへプチル等が挙げられる。

複素環基としては、脂環式複素環基および芳香族複素環基等が含まれる。脂環 式複素環基としては、例えば窒素原子、酸素原子および硫黄原子から選ばれる少 なくとも1個の原子を含む3~8員の単環性脂環式複素環基、3~8員の環が縮合し た二環または三環性で窒素原子、酸素原子および硫黄原子から選ばれる少なくと も 1 個の原子を含む縮環性脂環式複素環基等が挙げられ、より具体的にはテトラ ヒドロピラニル、テトラヒドロフラニル、ピラニル、チオピラニル、ピロリジニ ** ル、ピペリジノ、ピペリジル、パーヒドロアゼピニル、パーヒドロアゾシニル、 モルホリノ、モルホリニル、チオモルホリノ、チオモルホリニル、ピペラジニル、 ホモピペラジニル、ジオキソラニル、イミダゾリジニル、イミダゾリニル、ピラ ゾリジニル、インドリニル、イソインドリニル、2-ピロリニル、2-ピロリドニル、 3-ピロリドニル、2-ピペリドニル、3-ピペリドニル、4-ピペリドニル、パーヒド ロ-2-アゼピノニル、パーヒドロ-3-アゼピノニル、パーヒドロ-4-アゼピノニル、 2-チアゾリドニル、4-チアゾリドニル、2-オキサゾリドニル、4-オキサゾリドニ · ル、スクシンイミド、フタルイミド、グルタルイミド、マレイミド、ヒダントイ ニル、チアゾリジンジオニルおよびオキサゾリジンジオニル等が包含される。芳 ・香族複素環基としては、例えば窒素原子、酸素原子および硫黄原子から選ばれる



少なくとも 1 個の原子を含む 3~8 員の単環性芳香族複素環基、3~8 員の環が縮合した二環または三環性で窒素原子、酸素原子および硫黄原子から選ばれる少なくとも 1 個の原子を含む縮環性芳香族複素環基等が挙げられ、より具体的にはフリル、チエニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、オキサゾリル、イソオキサゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、1,2,3~オキサジアゾリル、1,2,4~オキサジアゾリル、1,3,4~オキサジアゾリル、1,2,3~チアジアゾリル、1,2,4~チアジアゾリル、1,3,4~チアジアゾリル、フラザニル、ピリジル、ピリミジニル、トリアジニル、ピラジニル、ピリダジニル、キノリル、イソキノリル、キナゾリニル、フタラジニル、プリニル、ベンゾジオキソリル、ベンゾオキサゾリル、ベングチアゾリル、ベングイミダゾリル、インドリル、イソインドリル、2~ピリドニル、4~ピリドニルおよびウラシリル等が包含される。

ヘテロアロイルの複素環基部分は、上記芳香族複素環基と同義である。

ハロゲンは、フッ素、塩素、臭素、ヨウ素の各原子を意味する。

置換低級アルケニル、置換低級アルコキシカルボニル、置換低級アルカノイル、 置換モノまたはジ低級アルキルアミノ、置換低級アルカノイルアミノ、置換低級 アルコキシ、置換低級アルキニル、置換低級アルカノイルオキシ、置換アラルキ ル、置換アリール、置換複素環基、置換アラルキルオキシ、置換アロイルおよび 置換ヘテロアロイルにおける置換基としては、同一または異なって例えば置換数 1 ~3 の、具体的には水酸基、カルボキシ、ニトロ、シアノ、アミノ、低級アルキル、 トリフルオロメチル、低級アルコキシ、低級アルコキシ低級アルキル、低級アル ケニル、低級アルキニル、低級アルコキシカルボニル、低級アルカノイル、トリ フルオロアセチル、低級アルカノイルオキシ、低級アルカノイルアミノ、低級ア ルキルアミノカルボニル、モノまたはジ低級アルキルアミノ、カルバモイル、メ チレンジオキシ、低級アルキルスルフィニル、低級アルキルスルホニル、メルカ プト、低級アルキルチオ、ハロゲン、アリール、アラルキル、アリールオキシ、 アラルキルオキシ、アロイル、複素環基等が挙げられる。また、これらの置換基 がさらに別の官能基、例えば、クロロフェニル、メチルカルバモイル、クロロベ ンジル、低級アルコキシベンジル等を有していてもよい。ここで、低級アルキル、 低級アルコキシ、低級アルケニル、低級アルキニル、低級アルコキシカルボニル、

低級アルカノイル、低級アルカノイルオキシ、低級アルカノイルアミノ、モノまたはジ低級アルキルアミノ、アリール、アラルキル、アラルキルオキシ、アロイル、複素環基およびハロゲンはそれぞれ前記と同義であり、低級アルキルアミノカルボニル、低級アルキルスルフィニル、低級アルキルスルホニル、低級アルキルチオおよび低級アルコキシベンジルの低級アルキル部分は、前記低級アルキルと同義であり、アリールオキシのアリール部分は、前記アリールと同義であり、低級アルコキシ低級アルキルにおいて、末端の低級アルコキシ部分の低級アルキル部分は前記低級アルキルと同義であり、アルキレン部分は前記低級アルキルから水素原子を1つ除いたものと同義である。

置換低級アルキルにおける置換基としては、同一または異なって例えば置換数 1 ~3 の、具体的には水酸基、カルボキシ、ニトロ、シアノ、アミノ、カルバモイル、 メチレンジオキシ、低級アルコキシ、低級アルコキシ低級アルキル、低級アルコ キシ低級アルコキシ、低級アルケニル、低級アルキニル、低級アルコキシカルボ ニル、低級アルカノイル、トリフルオロアセチル、低級アルカノイルオキシ、低 級アルカノイルアミノ、低級アルキルアミノカルボニル、モノまたはジ低級アル キルアミノ、低級アルキルスルフィニル、低級アルキルスルホニル、メルカプト、 低級アルキルチオ、ハロゲン、アリール、アラルキル、アリールオキシ、アラル キルオキシ、アロイル、置換もしくは非置換の複素環基等が挙げられる。また、 これらの置換基がさらに別の官能基、例えば、クロロフェニル、メチルカルバモ イル、クロロベンジル、低級アルコキシベンジル等を有していてもよい。ここで、 低級アルコキシ、低級アルコキシ低級アルキル、低級アルケニル、低級アルキニ ル、低級アルコキシカルボニル、低級アルカノイル、低級アルカノイルオキシ、 低級アルカノイルアミノ、低級アルキルアミノカルボニル、モノまたはジ低級ア ルキルアミノ、低級アルキルスルフィニル、低級アルキルスルホニル、低級アル キルチオ、アリール、アラルキル、アリールオキシ、アラルキルオキシ、アロイ ル、複素環基、ハロゲンおよび低級アルコキシベンジルはそれぞれ前記と同義で あり、低級アルコキシ低級アルコキシにおいて、末端の低級アルコキシ部分の低 級アルキル部分は前記低級アルキルと同義であり、アルキレン部分は前記低級ア ルキルから水素原子を1つ除いたものと同義であり、置換複素環基における置換



基としては、前記置換複素環基における置換基と同様のものが挙げられる。

化合物 (I) の薬理学的に許容される塩としては、例えば、金属塩、アンモニウム塩、有機アミン付加塩、アミノ酸付加塩、酸付加塩等を挙げることができる。薬理学的に許容される金属塩としては、例えば、ナトリウム塩、カリウム塩等のアルカリ金属塩、マグネシウム塩、カルシウム塩等のアルカリ土類金属塩、アルミニウム塩、亜鉛塩等を挙げることができ、薬理学的に許容されるアンモニウム塩としては、アンモニウム、テトラメチルアンモニウム等の塩を挙げることができる。薬理学的に許容される有機アミン付加塩としては、例えばモルホリン、ピペリジン等の塩基の付加塩を挙げることができ、薬理学的に許容されるアミノ酸付加塩としては、例えば、リジン、グリシン、フェニルアラニン等のアミノ酸の付加塩を挙げることができる。薬理学的に許容される酸付加塩としては、例えば、塩酸塩、硫酸塩、リン酸塩等の無機酸塩、酢酸塩、マレイン酸塩、フマル酸塩、酒石酸塩、クエン酸塩等の有機酸塩を挙げることができる。

本発明における化合物(I)の中には種々の立体異性体、位置異性体、互変異性体等が存在し得るものがある。本発明はこれらの可能な全ての異性体およびそれらの混合物を包含し、その混合比についても任意の比率でよい。

化合物(I)は、例えば以下に示す製造方法に従って得ることができる。

なお、以下に示した製造方法において、定義した基が実施方法の条件下で変化するか、または方法を実施するのに不適切な場合、有機合成化学で常用される方法、例えば、官能基の保護、脱保護 [例えば、プロテクティブ・グループス・イン・オーガニック・シンセシス第三版 (Protective Groups in Organic Synthesis, third edition)、グリーン (T. W. Greene) 著、ジョン・ワイリー・アンド・サンズ・インコーポレイテッド (John Wiley & Sons, Inc.) (1999 年) 等参照] 等の手段に付すことにより容易に製造を実施することができる。また、必要に応じて置換基導入等の反応工程の順序を変えることもできる。製造法1: 化合物 (I) のうち、X…Y…Z が R⁵N-C=O (式中、R⁵は前記と同義である)である化合物 (I-A) は、以下の工程 1 から工程 5 に従って製造することができる。

(式中、R¹、R²、R³、R⁴および R⁵はそれぞれ前記と同義である)

[工程1]

市販の化合物(II)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~大過剰量、好ましくは 1 当量~3 当量の化合物(III)と反応させることにより、化合物(IV)を得ることができる。化合物(III)としては市販品または公知の方法で合成したものを任意に用いることができる。反応は 0℃~100℃の間の温度、好ましくは 0℃~50℃の間の温度で行われ、通常 10 分~24 時間程度で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定されるものではないが、例えばテトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、ルメチルピロリドン、ジメチルスルホキシド、ピリジン、これら任意の混合物等、好ましくはテトラヒドロフラン、クロロホルム、それらの混合溶媒等を用いることができる。この反応は 1 当量~大過剰量、好ましくは 1 当量~10 当量の塩基を添加して行ってもよい。塩基としては、例えばトリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン(DBU)、ハルジメチルアニリン、ピリジン、キノリン、炭酸カリウム、炭酸ナト



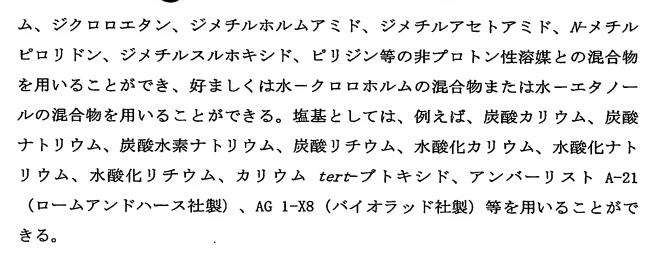
リウム、炭酸リチウム、炭酸水素ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化ナトリウム、水酸化リチウム、カリウム tert-ブトキシド等の各種有機もしくは無機塩基、またはアンバーリスト A-21 (ロームアンドハース社製)、AG 1-X8 (バイオラッド社製)等の各種塩基性アニオン交換レジン、ポリビニルピリジン、モルホリノメチルポリスチレン等の固相に担持された各種塩基等、好ましくはトリエチルアミンが用いられる。

[工程2]

工程1で得られる化合物(IV)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~5 当量の塩化チオニル、オキシ塩化リン等の塩素化剤で処理することにより、化合物(V)を得ることができる。反応は室温から 200℃の間の温度、好ましくは 50℃~100℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~50 時間程度で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定されるものではないが、例えばテトラヒドロフラン、ジオキサン、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、ジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ピリジン、トリエチルアミン、これら任意の混合物等、好ましくは 1 当量~10 当量の塩基を添加して行ってもよい。塩基としては、例えばトリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、DBU、M・ジメチルアニリン、ピリジン、キノリン等の各種有機塩基、ポリビニルピリジン、モルホリノメチルポリスチレン等の固相に担持された各種塩基等、好ましくはポリビニルピリジンが用いられる。

[工程3]

工程2で得られる化合物(V)をプロトン性溶媒中、1 当量~大過剰量、好ましくは 3 当量~10 当量の塩基で処理することにより、化合物(IV)を得ることができる。反応は室温から 200℃の間の温度、好ましくは 50℃~120℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~100 時間で終了する。反応に用いられる溶媒としては、例えば、水、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール等のプロトン性溶媒を単独でもしくは混合して用いるか、またはこれらのいずれかと、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジクロロメタン、クロロホル



[工程4]

工程3で得られる化合物(VI)を、反応に不活性な溶媒中、1 当量~10 当量の 縮合剤の存在下に 1 当量~5 当量の化合物 (VII) と反応させることにより、化合 物(VIII)を得ることができる。化合物(VII)としては市販品または公知の方法 によって合成された化合物を任意に用いることができる。反応は 0℃~150℃の間 の温度、好ましくは室温から 80℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~120 時間程 度で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性であればいずれでもよく、 特に限定されるものではないが、例えばジクロロメタン、クロロホルム、ジクロ ロエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、M-メチルピロリドン、 ジメチルスルホキシド、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、 ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセト ニトリル、これらの任意の混合物等、好ましくはクロロホルム、テトラヒドロフ ラン、それらの混合溶媒等を用いることができる。縮合剤としては、例えばジシ クロヘキシルカルボジイミド、ジイソプロピルカルボジイミド、N-エチル-N'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミドまたはその塩酸塩、ポリスチレンに担持 された *N*-エチル-*N '-*(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド、ポリスチレン に担持された N-ベンジル-N'-シクロヘキシルカルボジイミド、ベンゾトリアゾー ル-1-イルートリス(ジメチルアミノ)ホスホニウムヘキサフルオロリン化物塩、ジ フェニルホスホリルアジド等が挙げられ、好ましくは M-エチル-N'-(3-ジメチル アミノプロピル)カルボジイミドまたはその塩酸塩、ポリスチレンに担持されたル エチル-N'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド等を用いることができる。



また、この反応は、1 当量~5 当量の添加剤の共存下に行ってもよく、添加剤としては、例えば ルヒドロキシコハク酸イミド、1-ヒドロキシベングトリアゾール、3-ヒドロキシ-4-オキソ-3,4-ジヒドロ-1,2,3-ベングトリアジン等が挙げられ、好ましくは1-ヒドロキシベングトリアゾールを用いることができる。

[工程5]

工程 4 で得られる化合物(VIII)を、反応に不活性な溶媒中、1 当量~5 当量の 化合物(IX)とともに光延反応の条件に付すことにより、化合物(I-A)を得るこ とができる。化合物(IX)としては市販品または公知の方法によって合成された 化合物を任意に用いることができる。反応は 0℃~100℃の間の温度、好ましくは 室温から 60℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~50 時間程度で終了する。反応に 用いられる溶媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定される ものではないが、例えばジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ジメ チルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、N-メチルピロリドン、ジメチルスル ホキシド、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピ ルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、こ れらの任意の混合物等、好ましくはテトラヒドロフランを用いることができる。 光延反応に必要な縮合剤としては、同反応を行う際に一般的に用いられているも のを任意に利用することができ、例えば、1 当量~10 当量のジアルキルアゾジカ ルボキシレートと 1 当量~10 当量のトリフェニルホスフィンもしくはトリアルキ ルホスフィンの組み合わせ、1 当量~10 当量の(シアノメチレン) トリフェニル ホスホラン等、好ましくは 1 当量~3 当量のジエチルアゾジカルボキシレート (DEAD) と 1 当量~3 当量のトリフェニルホスフィンの組み合わせを用いることが できる。

製造法 2: 化合物 (I) のうち、 $X \cdots Y \cdots Z$ が $N = C - NR^6 R^7$ (式中、 R^6 および R^7 はそれ ぞれ前記と同義である) である化合物 (I - B) は、以下の工程 6 から工程 9 に従って製造することができる。

(式中、R¹、R²、R³、R⁴、R⁶および R⁷はそれぞれ前記と同義である)

[工程6]

製造法1の工程1で得られる化合物(IV)を、プロトン性溶媒中、1 当量~大過
剰量、好ましくは3当量~10 当量の塩基で処理することにより、化合物(X)を得
ることができる。反応は 0℃~100℃の間の温度、好ましくは室温から 80℃の間の
温度で行われ、通常1時間~100時間で終了する。反応に用いられる溶媒としては、
例えば、水、メタノール、エタノール、プロパノール、ブタノール等のプロトン
性溶媒を単独でもしくは混合して用いるか、またはこれらのいずれかと、テトラ
ヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ベン
ゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジクロロメタン、ク
ロロホルム、ジクロロエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、
ルメチルピロリドン、ジメチルスルホキシド、ピリジン等の非プロトン性溶媒と
の混合物を用いることができ、好ましくは水ーエタノールの混合物を用いることができる。塩基としては、例えば、炭酸カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸水素ナ
トリウム、炭酸リチウム、水酸化カリウム、水酸化ナトリウム、水酸化リチウム、
カリウム tert-プトキシド、アンバーリスト A-21 (ロームアンドハース社製)、
AG 1-X8 (バイオラッド社製) 等を用いることができる。

[工程7]

工程6で得られる化合物 (X) を、反応に不活性な溶媒中、1 当量~10 当量の縮 合剤の存在下に 1 当量~5 当量の化合物(VII)と反応させることにより、化合物 (XI) を得ることができる。化合物 (VII) としては市販品または公知の方法に よって合成された化合物を任意に用いることができる。反応は 0℃~150℃の間の 温度、好ましくは室温から 60℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~120 時間程度 で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性であればいずれでもよく、特 に限定されるものではないが、例えばジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロ エタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、ルーメチルピロリドン、 ジメチルスルホキシド、テトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、 ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセト ニトリル、これらの任意の混合物等、好ましくはクロロホルム、テトラヒドロフ ラン、それらの混合溶媒等を用いることができる。縮合剤としては、例えばジシ クロヘキシルカルボジイミド、ジイソプロピルカルボジイミド、*N*-エチル-*N '-* (3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミドまたはその塩酸塩、ポリスチレンに担持 された N-エチル-N'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド、ポリスチレン に担持された N-ベンジル-N'-シクロヘキシルカルボジイミド、ベンゾトリアゾー ル-1-イル-トリス(ジメチルアミノ)ホスホニウムヘキサフルオロリン化物塩、ジ フェニルホスホリルアジド等が挙げられ、好ましくは M-エチル-N'-(3-ジメチル アミノプロピル)カルボジイミドまたはその塩酸塩、ポリスチレンに担持された *N*-エチル-N'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド等を用いることができる。 また、この反応は、1 当量~5 当量の添加剤の共存下に行ってもよく、添加剤とし ては、例えば ルーヒ ドロキシコハク酸イミド、1-ヒ ドロキシベンゾトリアゾール、 3-ヒドロキシ-4-オキソ-3, 4-ジヒドロ-1, 2, 3-ベンゾトリアジン等が挙げられ、好 ましくは 1-ヒドロキシベンゾトリアゾールを用いることができる。

[工程8]

工程 7 で得られる化合物(XI)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~5 当量の塩化 チオニル、オキシ塩化リン等の塩素化剤で処理することにより、化合物(XII)を 得ることができる。反応は室温から 200℃の間の温度、好ましくは 50℃~100℃の 間の温度で行われ、通常 1 時間~50 時間程度で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定されるものではないが、例えばテトラヒドロフラン、ジオキサン、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、ジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ピリジン、トリエチルアミン、これら任意の混合物等、好ましくはクロロホルムを用いることができる。この反応は 1 当量~大過剰量、好ましくは 1 当量~10 当量の塩基を添加して行ってもよい。塩基としては、例えばトリエチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、DBU、M、M・ジメチルアニリン、ピリジン、キノリン等の各種有機塩基、ポリビニルピリジン、モルホリノメチルポリスチレン等の固相に担持された各種塩基等、好ましくはポリビニルピリジンが用いられる。

[工程9]

工程 8 で得られる化合物(XII)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~10 当量、好 ましくは 2 当量~5 当量の化合物 (XIII) と反応させることにより、化合物 (I-B)を得ることができる。反応は室温~200℃の間の温度、好ましくは 50℃~100℃ の間の温度で行われ、通常1時間~100時間程度で終了する。反応に用いられる溶 媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定されるものではない が、例えばテトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピ ルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジ クロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチ ルアセトアミド、Mメチルピロリドン、ジメチルスルホキシド、ピリジン、これ ら任意の混合物等、好ましくはテトラヒドロフラン、クロロホルム、それらの混 合溶媒等を用いることができる。この反応は 1 当量~大過剰量、好ましくは 1 当 量~10 当量の塩基を添加して行ってもよい。塩基としては、例えばトリエチルア ミン、ジイソプロピルエチルアミン、DBU、*N, N*-ジメチルアニリン、ピリジン、キ ノリン、炭酸カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸リチウム、炭酸水素ナトリウム、 水酸化カリウム、水酸化ナトリウム、水酸化リチウム、カリウム tert-ブトキシド 等の各種有機もしくは無機塩基、またはアンバーリスト A-21(ロームアンドハー ス社製)、AG 1-X8(バイオラッド社製)等の各種塩基性アニオン交換レジン、ポ リビニルピリジン、モルホリノメチルポリスチレン等の固相に担持された各種塩 基等、好ましくはポリビニルピリジンが用いられる。

製造法3: 化合物 (I) のうち、 $X \cdots Y \cdots Z$ が $C = C - NR^{6\alpha}R^{7\alpha}$ (式中、 $R^{6\alpha}$ および $R^{7\alpha}$ はそれぞれ前記と同義である) である化合物 (I-C) は、以下の工程 10 から工程 13 に従って製造することができる。

HO

CI

$$R^1 R^2$$

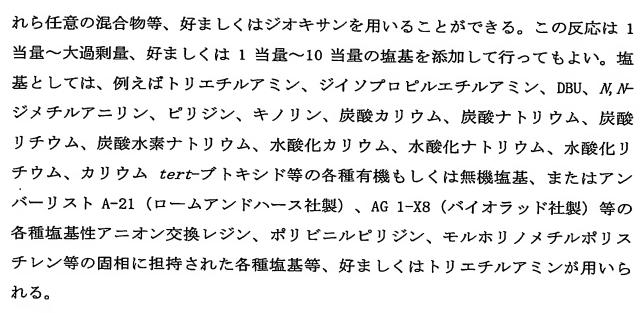
OH

 $R^1 R^2$

O

(式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^{6a} および R^{7a} はそれぞれ前記と同義である) [工程 1 0]

市販の化合物(XIV)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~大過剰量、好ましくは 1 当量~3 当量の化合物(III)と反応させることにより、化合物(XV)を得ることができる。化合物(III)としては市販品または公知の方法で合成したものを任意に用いることができる。反応は 50℃~200℃の間の温度、好ましくは 80℃~150℃の間の温度で行われ、通常 1 時間~10 日間程度で終了する。反応に用いられる溶媒は反応に不活性なものであればいずれでもよく、特に限定されるものではないが、例えばテトラヒドロフラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、ジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、ルメチルピロリドン、ジメチルスルホキシド、ピリジン、こ



[工程11]

工程 7 に記載した方法に準じ、工程 1 0 で得られる化合物(XV)を反応に不活性な溶媒中、1 当量~10 当量の縮合剤の存在下に、1 当量~5 当量の化合物(VII)と、0°C~150°Cの間の温度、好ましくは室温から 60°Cの間の温度で、1 時間~120 時間反応させることにより、化合物(XVI)を得ることができる。

[工程12]

工程 8 に記載した方法に準じ、工程 1 1 で得られる化合物(XVI)を反応に不活性な溶媒中、1 当量 \sim 5 当量の塩素化剤で、塩基の存在下または非存在下に、室温から 200° Cの間の温度、好ましくは 50° C \sim 120 $^{\circ}$ Cの間の温度で、1 時間 \sim 50 時間処理することにより、化合物(XVII)を得ることができる。

[工程13]

ラン、ジオキサン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、ベンゼン、トルエン、キシレン、酢酸エチル、アセトニトリル、これらの任意の混合物等、好ましくはテトラヒドロフランを用いることができる。縮合剤としては、例えばジアルキルアプジカルボキシレートとトリフェニルホスフィンもしくはトリアルキルホスフィンの組み合わせ、(シアノメチレン)トリフェニルホスホラン等、好ましくは(シアノメチレン)トリフェニルホスホランを用いることができる。

上記の各製造法における中間体および目的化合物は、有機合成化学の分野で常用される分離精製法、例えば、濾過、抽出、洗浄、乾燥、濃縮、再結晶、各種クロマトグラフィー等を用いて単離・精製することができる。さらに一般的な並列合成法で常用される精製法により、例えば、スカベンジャーレジン、イオン交換レジンを用いて精製することができる。また、製造中間体は特に精製することなく次の反応に供することもできる。化合物(I)の塩を製造する場合には、上記反応工程において最終生成物が塩の形で得られる場合はそのまま精製すればよく、最終生成物が遊離形態の化合物として得られる場合には、この化合物を適当な溶媒に溶解または懸濁させ、酸または塩基を加えて塩を形成させた後に目的物を単離・精製すればよい。また、塩の形態で得られた最終生成物を遊離形態の化合物に変換した後、さらに目的の塩に変換してもよい。

化合物(I)のうち、本発明の医薬の有効成分として好適な化合物の具体例を以下に示す。ただし、本発明の化合物はこれらに限定されることはない。

なお、第1表~第3表には各化合物の部分構造の一覧を記し、Me はメチルを、 Et はエチルを表す。

第1-1表

| 番号 | •−NR ³ R ⁴ | 番号 | ←NR ³ R ⁴ |
|------|----------------------------------|--------|---------------------------------|
| A-01 | H. Me | A-12 | H |
| A-02 | H | · A-13 | -N |
| A-03 | H | A-14 | H Me |
| A-04 | H N Me | A-15 | H N Me Me |
| A-05 | N Me | A-16 | - N Me |
| A-06 | ⊷N N O Me | A-17 | H |
| A-07 | H Me Me | A-18 | H |
| A-08 | H OMe | A-19 | H |
| A-09 | H | A-20 | HOMe |
| A-10 | H | A-21 | , H F |
| A-11 | Me | A-22 | OMe H OMe |



| 番号 | ⊷NR ³ R ⁴ | 番号 | ⊷NR ³ R ⁴ |
|------|---------------------------------|----------------|---------------------------------|
| A-23 | H Me | A-34 | Me √N CN |
| A-24 | F ₃ C N | A-35 | •−N—Me |
| A-25 | H O Me | A-36 | |
| A-26 | H | A-37 | Me |
| A-27 | $N \sim N$ | A-38 | •−N N-Me |
| A-28 | N CO ₂ Et | · A-3 9 | •-NN_ |
| A-29 | H N | A-40 | -N_N-NO Me |
| A-30 | -N-NO | A-41 | Me Me |
| A-31 | H Me N Me | A-42 | Me |
| A-32 | Me N | · A-43 | |
| A-33 | ← N | A-44 | H Me Me |

第1-3表

| 番号 | ⊷NR ³ R ⁴ | _ | 番号 | ⊷NR ³ R ⁴ |
|------|---|---|------|---------------------------------|
| A-45 | Me N Me | | A-56 | Me N |
| A-46 | N. | | A-57 | H Me |
| A-47 | Me Me | | A-58 | |
| A-48 | , H | | A-59 | F |
| A-49 | F | | A-60 | H S |
| A-50 | H OMe | | A-61 | N |
| A-51 | N CI | | A-62 | |
| A-52 | -HF | | A-63 | - N |
| A-53 | H | | A-64 | , H |
| A-54 | \mathcal{H} \mathcal{M} \mathcal{M} | | A-65 | - N |
| A-55 | H | _ | A-66 | -N |

第1-4表

| 番号 | ⊷NR ³ R ⁴ |
|------|---------------------------------|
| A-67 | H |
| A-67 | Me H N |
| A-69 | H |
| A-70 | OMe |
| A-71 | Me N Me |
| A-72 | NO |
| | |



| 番号 | - R ⁵ | 番号 | •−R ⁵ |
|------|-------------------------|-------------------|--------------------|
| B-01 | | B-12 | Me |
| B-02 | . ✓✓Me | B-13 | Me ,∕∕ F |
| B-03 | • − H | B-14 | |
| B-04 | OMe | B-15 | Me Me |
| B-05 | Me Me | B-16 | SMe |
| B-06 | S | B-17 | |
| B-07 | | B-18 | |
| B-08 | | _. B-19 | |
| B-09 | 0 | B-20 | S |
| B-10 | MeO | B-21 | O Me Me Me |
| B-11 | CI | B-22 | |
| | | | |



| 番号 | •–R ⁵ | | 番号 | ⊷R ⁵ |
|-------------|------------------|---|------|-----------------|
| B-23 | •(~O)Me | | B-34 | OMe |
| , В-24 | | | B-35 | O'Me |
| B-25 | Me O | | B-36 | OMe |
| B-26 | ON N | | B-37 | ÓMe •∕∕∕∕ |
| B-27 | \sim | | B-38 | ~ |
| B-28 | Me | | B-39 | Me |
| B-29 | F | • | B-40 | • Me |
| B-30 | | | B-41 | ✓Me |
| B-31 | Me Me Me | | B-42 | Me Me |
| B-32 | Me Me Me | | B-43 | Me Me |
| B-33 | CI | | B-44 | ~ |



| | | | | | | |
|-------------|------------------|------|------------------|--|--|--|
| 番号 | •–R ⁵ | 番号 | •–R ⁵ | | | |
| B-45 | Me | B-56 | OMe | | | |
| B-46 | Me | B-57 | F | | | |
| B-47 | Me Me | B-58 | Ė | | | |
| B-48 | CI | | Me | | | |
| B-49 | Me | | · | | | |
| B-50 | F | | | | | |
| B-51 | CI | | | | | |
| B-52 | F | | | | | |
| B-53 | H · | | | | | |
| B-54 | Me | | | | | |
| B-55 | F | | | | | |

第3-1表

| | · | | |
|------|----------------------------------|------|----------------------------------|
| 番号 | •−NR ⁶ R ⁷ | 番号 | •−NR ⁶ R ⁷ |
| C-01 | H. Me | C-12 | H |
| C-02 | - N | C-13 | -N OMe |
| C-03 | ← N | C-14 | , N |
| C-04 | Me Me | C-15 | |
| C-05 | -N_OMe | C-16 | OMe H |
| C-06 | HO | C-17 | F ₃ C OMe |
| C-07 | ⊷N—Me Me | C-18 | H N Me |
| C-08 | •−N O Me | C-19 | F |
| C-09 | Me H N | C-20 | - -N_N-√_}-F |
| C-10 | -N-S | C-21 | HN NMe |
| C-11 | - N Me | C-22 | NN⟨O Me |
| | | | |

| • | | | |
|------|----------------------------------|------|----------------------------------|
| 番号 | ∙-NR ⁶ R ⁷ | 番号 | ∙−NR ⁶ R ⁷ |
| C-23 | H | C-34 | |
| C-24 | -N_N-N- | C-35 | N O Me |
| C-25 | H N-Me Me | C-36 | |
| C-26 | •−N_N-Me | C-37 | H Me N Me |
| C-27 | HN | C-38 | Me Me N. Me |
| C-28 | , N | C-39 | HMe Me Me N.Me |
| C-29 | H | C-40 | |
| C-30 | N NO | C-41 | $N \sim N $ |
| C-31 | H Me N Me | C-42 | H N N Me |
| C-32 | Me N | C-43 | H Me N |
| C-33 | - NN | C-44 | HN Me |
| | | | |

第3-3表

| 番号 | ►NR ⁶ R ⁷ |
|------|---------------------------------|
| C-45 | $N \sim N$ |
| C-46 | H |
| C-47 | H O Me |
| C-48 | - N_ |

(a) 化合物 (I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-R5、機器データの順に示す。

- 1-1; A-01; B-01; MS m/z $(M + H)^+$ 351 1-2; A-01; B-02; 355 $(M + H)^+$ MS m/z1-3; A-01; B-03; $(M + H)^+$ MS m/z313 1-4; A-01; B-04; MS m/z371 $(M + H)^+$ 1-5; MS m/zA-01; B-05; 383 $(M + H)^+$ 1-6; A-01; B-06; MS m/z $(M + H)^+$ 423 1-7; A-01; B-07; MS m/z403 $(M + H)^+$ 1-8; A-01; B-08; MS m/z409 $(M + H)^+$ 1-9; A-01; B-09; MS m/z411 $(M + H)^+$
- 1-10; A-01; B-10; MS m/z 433 $(M + H)^+$
- 1-11; A-01; B-11; MS m/z 437 (M + H)⁺



| 1-12; | A-01; | B-12; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-13; | A-01; | B-13; | MS m/z | 359 | (M + H)+ |
| 1-14; | A-01; | B-14; | MS m/z | 367 | (M + H)+ |
| 1-15; | A-01; | B-15; | MS m/z | 381 | (M + H)+ |
| 1-16; | A-01; | B-16; | MS m/z | 387 | (M + H)+ |
| 1-17; | A-01; | B-17; | MS m/z | 393 | (M + H)+ |
| 1-18; | A-01; | B-18; | MS m/z | 397 | (M + H)+ |
| 1-19; | A-01; | B-19; | MS m/z | 407 | (M + H)+ |
| 1-20; | A-01; | B-20; | MS m/z | 409 | (M + H)+ |
| 1-21; | A-01; | B-21; | MS m/z | 413 | (M + H)+ |
| 1-22; | A-01; | B-22; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| 1-23; | A-01; | B-23; | MS m/z | 429 | (M + H) ⁺ |
| 1-24; | A-01; | B-24; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-25; | A-01; | B-25; | MS m/z | 398 | (M + H)+ |
| 1-26; | A-01; | B-26; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 1-27; | A-01; | B-27; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 1-28; | A-01; | B-28; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 1-29; | A-01; | B-29; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-30; | A-01; | B-30; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 1-31; | A-01; | B-31; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-32; | A-01; | B-32; | MS m/z | 451 | (M + H) + |
| 1-33; | A-01; | B-33; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 1-34; | A-01; | B-34; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-35; | A-01; | B-35; | MS m/z | 475 | (M + H)+ |
| 1-36; | A-01; | B-36; | MS m/z | 493 | (M + H)+ |
| 1-37; | A-02; | B-01; | MS m/z | 363 | (M + H)+ |
| 1-38; | A-02; | B-02; | MS m/z | 367 | (M + H)+ |
| 1-39; | A-02; | B-03; | MS m/z | 325 | (M + H)+ |
| 1-40; | A-02; | B-04; | MS m/z | 383 | (M + H)+ |



| 1-41; | A-02; | B-05; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-42; | A-02; | B-06; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-43; | A-02; | B-07; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-44; | A-02; | B-08; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-45; | A-02; | B-09; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 1-46; | A-02; | B-10; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-47; | A-02; | B-11; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-48; | A-02; | B-12; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-49; | A-02; | B-13; | MS m/z | 371 | (M + H) + |
| 1-50; | A-02; | B-14; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 1-51; | A-02; | B-15; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 1-52; | A-02; | B-16; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 1-53; | A-02; | B-17; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 1-54; | A-02; | B-18; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-55; | A-02; | B-19; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 1-56; | A-02; | B-20; | MS m/z | 421 | (M + H) + |
| 1-57; | A-02; | B-21; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-58; | A-02; | B-22; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-59; | A-02; | B-23; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-60; | A-02; | B-24; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-61; | A-02; | B-25; | MS m/z | 410 | (M + H)+ |
| 1-62; | A-02; | B-26; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 1-63; | A-02; | B-27; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 1-64; | A-02; | B-28; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-65; | A-02; | B-29; | MS m/z | 447 | (M + H) |
| 1-66; | A-02; | B-30; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-67; | A-02; | B-31; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-68; | A-02; | B-32; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-69; | A-02; | B-33; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |



| 1-70; | A-02; | B-34; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-71; | A-02; | B-35; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-72; | A-02; | B-36; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-73; | A-03; | B-01; | MS m/z | 363 | (M + H)+ |
| 1-74; | A-03; | B-02; | MS m/z | 367 | (M + H)+ |
| 1-75; | A-03; | B-03; | MS m/z | 325 | (M + H)+ |
| 1-76; | A-03; | B-04; | MS m/z | 383 | (M + H)+ |
| 1-77; | A-03; | B-05; | MS m/z | 395 | (M + H)+ |
| 1-78; | A-03; | B-06; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-79; | A-03; | B-07; | MS m/z | 415 | (M + H)+ |
| 1-80; | A-03; | B-08; | MS m/z | 421 | (M + H) + |
| 1-81; | A-03; | B-09; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
| 1-82; | A-03; | B-10; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 1-83; | A-03; | B-11; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-84; | A-03; | B-12; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 1-85; | A-03; | B-13; | MS m/z | 371 | (M + H)+ |
| 1-86; | A-03; | B-14; | MS m/z | 379 | (M + H)+ |
| 1-87; | A-03; | B-15; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 1-88; | A-03; | B-16; | MS m/z | 399 | (M + H)+ |
| 1-89; | A-03; | B-17; | MS m/z | 405 | (M + H)+ |
| 1-90; | A-03; | B-18; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-91; | A-03; | B-19; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 1-92; | A-03; | B-20; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-93; | A-03; | B-21; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 1-94; | A-03; | B-22; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-95; | A-03; | B-23; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 1-96; | A-03; | B-24; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 1-97; | A-03; | B-25; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 1-98; | A-03; | B-26; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |



| 1-99; | A-03; | B-27; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-100; | A-03; | B-28; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 1-101; | A-03; | B-29; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-102; | A-03; | B-30; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-103; | A-03; | B-31; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-104; | A-03; | B-32; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-105; | A-03; | B-33; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-106; | A-03; | B-34; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-107; | A-03; | B-35; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 1-108; | A-03; | B-36; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-109; | A-04; | B-01; | MS m/z | 365 | $(M + H)^+$ |
| 1-110; | A-04; | B-02; | MS m/z | 369 | (M + H) ⁺ |
| 1-111; | A-04; | B-03; | MS m/z | 327 | (M + H)+ |
| 1-112; | A-04; | B-04; | MS m/z | 385 | (M + H) + |
| 1-113; | A-04; | B-05; | MS m/z | 397 | $(M + H)^+$ |
| 1-114; | A-04; | B-06; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 1-115; | A-04; | B-07; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-116; | A-04; | B-08; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 1-117; | A-04; | B-09; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-118; | A-04; | B-10; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-119; | A-04; | B-11; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-120; | A-04; | B-12; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-121; | A-04; | B-13; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 1-122; | A-04; | B-14; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
| 1-123; | A-04; | B-15; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 1-124; | A-04; | B-16; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 1-125; | A-04; | B-17; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 1-126; | A-04; | B-18; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-127; | A-04; | B-19; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |

| 1-128; | A-04; | B-20; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-129; | A-04; | B-21; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 1-130; | A-04; | B-22; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-131; | A-04; | B-23; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-132; | A-04; | B-24; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-133; | A-04; | B-25; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 1-134; | A-04; | B-26; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-135; | A-04; | B-27; | MS m/z | 452 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-136; | A-04; | B-28; | MS m/z | 445 | (M + H) ⁺ |
| 1-137; | A-04; | B-29; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-138; | A-04; | B-30; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-139; | A-04; | B-31; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-140; | A-04; | B-32; | MS m/z | 465 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-141; | A-04; | B-33; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-142; | A-04; | B-34; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-143; | A-04; | B-35; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-144; | A-04; | B-36; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 1-145; | A-05; | B-01; | MS m/z | 379 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-146; | A-05; | B-02; | MS m/z | 383 | $(M + H)^+$ |
| 1-147; | A-05; | B-03; | MS m/z | 341 | $(M + H)^+$ |
| 1-148; | A-05; | B-04; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 1-149; | A-05; | B-05; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-150; | A-05; | B-06; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-151; | A-05; | B-07; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-152; | A-05; | B-08; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 1-153; | A-05; | B-09; | MS m/z | 439 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-154; | A-05; | B-10; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-155; | A-05; | B-11; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-156; | A-05; | B-12; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |



| 1-157; | A-05; | B-13; | MS m/z | 387 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-158; | A-05; | B-14; | MS m/z | 395 | (M + H)* |
| 1-159; | A-05; | B-15; | MS m/z | 409 | (M + H)+ |
| 1-160; | A-05; | B-16; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-161; | A-05; | B-17; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-162; | A-05; | B-18; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 1-163; | A-05; | B-19; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-164; | A-05; | B-20; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-165; | A-05; | B-21; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 1-166; | A-05; | B-22; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 1-167; | A-05; | B-23; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 1-168; | A-05; | B-24; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-169; | A-05; | B-25; | MS m/z | 426 | (M + H)+ |
| 1-170; | A-05; | B-26; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 1-171; | A-05; | B-27; | MS m/z | 466 | (M + H) + |
| 1-172; | A-05; | B-28; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-173; | A-05; | B-29; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 1-174; | A-05; | B-30; | MS m/z | 475 | (M + H)+ |
| 1-175; | A-05; | B-31; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-176; | A-05; | B-32; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-177; | A-05; | B-33; | MS m/z | 479 | (M + H) + |
| 1-178; | A-05; | B-34; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-179; | A-05; | B-35; | MS m/z | 503 | (M + H)+ |
| 1-180; | A-05; | B-36; | MS m/z | 521 | (M + H) + |
| 1-181; | A-06; | B-01; | MS m/z | 381 | (M + H) + |
| 1-182; | A-06; | B-02; | MS m/z | 385 | (M + H)+ |
| 1-183; | A-06; | B-03; | MS m/z | 343 | (M + H) + |
| 1-184; | A-06; | B-04; | MS m/z | 401 | (M + H)+ |
| 1-185; | A-06; | B-05; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |



| 1-186; | A-06; | B-06; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
|---------|-------|--------|----------|-----|-------------|
| 1-187 ; | A-06; | B-07; | MS m/z | 433 | (M + H)* |
| 1-188; | A-06; | B-08; | MS m/z | 439 | $(M + H)^*$ |
| 1-189; | A-06; | B-09; | MS m/z | 441 | (M + H)* |
| 1-190; | A-06; | B-10; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-191; | A-06; | B-11; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 1-192; | A-06; | B-12; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-193; | A-06; | B-13; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 1-194; | A-06; | B-14; | MS m/z | 397 | (M + H)+ |
| 1-195; | A-06; | B-15; | · MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-196; | A-06; | B-16; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| 1-197; | A-06; | B-17; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
| 1-198; | A-06; | B-18.; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 1-199; | A-06; | B-19; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-200; | A-06; | B-20; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 1-201; | A-06; | B-21; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-202; | A-06; | B-22; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 1-203; | A-06; | B-23; | MS m/z | 459 | (M + H)+ |
| 1-204; | A-06; | B-24; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-205; | A-06; | B-25; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 1-206; | A-06; | B-26; | MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 1-207; | A-06; | B-27; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 1-208; | A-06; | B-28; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-209; | A-06; | B-29; | MS m/z | 465 | (M + H)* |
| 1-210; | A-06; | B-30; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-211; | A-06; | B-31; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-212; | A-06; | B-32; | MS m/z | 481 | (M + H)+ |
| 1-213; | A-06; | B-33; | MS m/z | 481 | (M + H)+ |
| 1-214; | A-06; | B-34; | MS m/z | 491 | (M + H)* |

| | | | | | • |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-215; | A-06; | B-35; | MS m/z | 505 | (M + H) ⁺ |
| 1-216; | A-06; | B-36; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 1-217; | A-07; | B-01; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 1-218; | A-07; | B-02; | MS m/z | 383 | $(M + H)^+$ |
| 1-219; | A-07; | B-03; | MS m/z | 341 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-220; | A-07; | B-04; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 1-221; | A-07; | B-05; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-222; | A-07; | B-06; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 1-223; | A-07; | B-07; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-224; | A-07; | B-08; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 1-225; | A-07; | B-09; | MS m/z | 439 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-226; | A-07; | B-10; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-227; | A-07; | B-11; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 1-228; | A-07; | B-12; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 1-229; | A-07; | B-13; | MS m/z | 387 | (M + H) + . |
| 1-230; | A-07; | B-14; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 1-231; | A-07; | B-15; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-232; | A-07; | B-16; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-233; | A-07; | B-17; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-234; | A-07; | B-18; | MS m/z | 425 | (M + H) + |
| 1-235; | A-07; | B-19; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-236; | A-07; | B-20; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 1-237; | A-07; | B-21; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-238; | A-07; | B-22; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-239; | A-07; | B-23; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-240; | A-07; | B-24; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 1-241; | A-07; | B-25; | MS m/z | 426 | (M + H)+ |
| 1-242; | A-07; | B-26; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 1-243; | A-07; | B-27; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 1-244; | A-07; | B-28; | MS m/z | 459 | (M + H) ⁺ |
|--------|--------|-------|--------|------|----------------------|
| 1-245; | A-07; | B-29; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-246; | A-07; | B-30; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-247; | A-07; | B-31; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-248; | A-07; | B-32; | MS m/z | 479 | (M·+ H)+ |
| 1-249; | A-07; | B-33; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-250; | A-07; | B-34; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-251; | A-07; | B-35; | MS m/z | 503 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-252; | A-07; | B-36; | MS m/z | 521 | (M + H)+ |
| 1-253; | A-08; | B-01; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
| 1-254; | A-08; | B-02; | MS m/z | 385 | $(M + H)^+$ |
| 1-255; | A-08; | B-03; | MS m/z | 343 | $(M + H)^+$ |
| 1-256; | A-08; | B-04; | MS m/z | 401 | (M + H)+ |
| 1-257; | A-08; | B-05; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 1-258; | A-08; | B-06; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| 1-259; | A-08; | B-07; | MS m/z | 433 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-260; | A-08; | B-08; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 1-261; | A-08; | B-09; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-262; | A-08; | B-10; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-263; | A∸08 ; | B-11; | MS m/z | 467· | $(M + H)^+$ |
| 1-264; | A-08; | B-12; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-265; | A-08; | B-13; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 1-266; | A-08; | B-14; | MS m/z | 397 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-267; | A-08; | B-15; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-268; | A-08; | B-16; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-269; | A-08; | B-17; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 1-270; | A-08; | B-18; | MS m/z | 427 | (M + H)+ |
| 1-271; | A-08; | B-19; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |

1-272; A-08; B-20; MS m/z 439 $(M + H)^+$



| 1-273; | A-08; | B-21; | MS m/z | 443 | (M + H)* |
|--------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-274; | A-08; | B-22; | MS m/z | 447 | (M + H)* |
| 1-275; | A-08; | B-23; | MS m/z | 459 | (M + H) + |
| 1-276; | A-08; | B-24; | MS m/z | 459 | (M + H) + |
| 1-277; | A-08; | B-25; | MS m/z | 428 | (M + H)* |
| 1-278; | A-08; | B-26; | MS m/z | 468 | (M + H) + |
| 1-279; | A-08; | B-27; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 1-280; | A-08; | B-28; | MS m/z | 461 | (M + H) + |
| 1-281; | A-08; | B-29; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 1-282; | A-08; | B-30; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-283; | A-08; | B-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-284; | A-08; | B-32; | MS m/z | 481 | (M + H) + |
| 1-285; | A-08; | B-33; | MS m/z | 481 | (M + H) + |
| 1-286; | A-08; | B-34; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-287; | A-08; | B-35; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-288; | A-08; | B-36; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 1-289; | A-09; | B-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 1-290; | A-09; | B-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-291; | A-09; | B-03; | MS m/z | 367 | $(M + H)^+$ |
| 1-292; | A-09; | B-04; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 1-293; | A-09; | B-05; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 1-294; | A-09; | B-06; | MS m/z | 477 | (M + H) + |
| 1-295; | A-09; | B-07; | MS m/z | 457 | (M + H) + |
| 1-296; | A-09; | B-08; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-297; | A-09; | B-09; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-298; | A-09; | B-10; | MS m/z | 487 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-299; | A-09; | B-11; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-301; | A-09°; | B-12; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 1-302; | A-09; | B-13; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| | | | | 30 | • |



| | | • | | | |
|--------|-------|--------|--------|-----|----------------------|
| 1-303; | A-09; | B-14; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-304; | A-09; | B-15; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-305; | A-09; | B-16; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 1-306; | A-09; | B-17; | MS m/z | 447 | (M + H) + |
| 1-307; | A-09; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-308; | A-09; | B-19; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-309; | A-09; | B-20; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 1-310; | A-09; | B-21; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 1-311; | A-09; | B-22; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 1-312; | A-09; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-313; | A-09; | B-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-314; | A-09; | B-25·; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 1-315; | A-09; | B-26; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-316; | A-09; | B-27; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-317; | A-09; | B-28; | MS m/z | 485 | (M + H) |
| 1-318; | A-09; | B-29; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-319; | A-09; | B-30; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-320; | A-09; | B-31; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 1-321; | A-09; | B-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-322; | A-09; | B-33; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-323; | A-09; | B-34; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-324; | A-09; | B-35; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-325; | A-09; | B-36; | MS m/z | 547 | (M + H) ⁺ |
| 1-326; | A-09; | B-48; | MS m/z | 477 | (M + H) ⁺ |
| 1-327; | A-09; | B-49; | MS m/z | 475 | (M + H) ⁺ |
| 1-328; | A-09; | B-50; | MS m/z | 461 | (M + H) ⁺ |
| 1-329; | A-09; | B-51; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-330; | A-09; | B-52; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-331; | A-09; | B-53; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |

| 0 200 | .,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,, | | | | |
|--------|---|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-332; | A-09; | B-54; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-333; | A-09; | B-55; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-334; | A-09; | B-56; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-335; | A-09; | B-57; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-336; | A-09; | B-58; | MS m/z | 457 | (M + H) ⁺ |
| | | | | | |

1-337; A-10; B-01; MS m/z 405
$$(M + H)^+$$

1-338; A-10; B-02; MS m/z 409
$$(M + H)^+$$

1-339; A-10; B-03; MS m/z 367
$$(M + H)^+$$

1-340; A-10; B-04; MS m/z 425
$$(M + H)^+$$

$$1-341$$
; A-10; B-05; MS m/z 437 (M + H)⁺

$$1-342$$
; A-10; B-06; MS m/z 477 (M + H)⁺

$$1-343$$
; A-10; B-07; MS m/z 457 (M + H)⁺

$$1-344$$
; A-10; B-08; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$1-345$$
; A-10; B-09; MS m/z 465 (M + H)⁺

$$1-346$$
; A-10; B-10; MS m/z 487 (M + H)⁺

$$1-347$$
; A-10; B-11; MS m/z 491 (M + H)⁺

$$1-348$$
; A-10; B-12; MS m/z 499 (M + H)⁺

$$1-349$$
; A-10; B-13; MS m/z 413 (M + H)⁺

1-350; A-10; B-14; MS m/z 421
$$(M + H)^+$$

$$1-351$$
; A-10; B-15; MS m/z 435 (M + H)⁺

$$1-352$$
; A-10; B-16; MS m/z 441 (M + H)⁺

$$1-353$$
; A-10; B-17; MS m/z 447 (M + H)⁺

1-354; A-10; B-18; MS m/z 451
$$(M + H)^+$$

1-355; A-10; B-19; MS
$$m/z$$
 461 $(M + H)^+$

$$1-356$$
; A-10; B-20; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$1-357$$
; A-10; B-21; MS m/z 467 (M + H)⁺

1-358; A-10; B-22; MS
$$m/z$$
 471 (M + H)⁺

1-359; A-10; B-23; MS
$$m/z$$
 483 $(M + H)^+$

$$1-360$$
; A-10; B-24; MS m/z 483 (M + H)⁺

| 1-361; | A-10; | B-25; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
|--------|--------|--------|--------|-----|-------------|
| 1-362; | A-10; | B-26; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-363; | A-10 ; | B-27; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-364; | A-10; | B-28; | MS m/z | 485 | (M + H)+ |
| 1-365; | A-10; | B-29; | MS m/z | 489 | (M + H)+ |
| 1-366; | A-10 ; | B-30°; | MS m/z | 501 | (M + H) + |
| 1-367; | A-10; | B-31; | MS m/z | 503 | (M + H)+ |
| 1-368; | A-10 ; | B-32; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-369; | A-10 ; | B-33; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-370; | A-10 ; | B-34; | MS m/z | 515 | (M + H)+ |
| 1-371; | A-10; | B-35; | MS m/z | 529 | (M + H)+ |
| 1-372; | A-10; | B-36; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 1-373; | A-11 ; | B-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 1-374; | A-11; | B-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-375; | A-11; | B-03; | MS m/z | 367 | $(M + H)^+$ |
| 1-376; | A-11; | B-04; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-377; | A-11; | B-05; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 1-378; | A-11 ; | B-06; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-379; | A-11 ; | B-07; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-380; | A-11; | B-08; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-381; | A-11; | B-09; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-382; | A-11; | B-10; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-383; | A-11; | B-11; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 1-384; | A-11; | B-12; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
| 1-385; | A-11; | B-13; | MS m/z | 413 | (M + H)+ |
| 1-386; | A-11; | B-14; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-387; | A-11; | ₿-15; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-388; | A-11; | B-16; | MS m/z | 441 | (M + H) + |
| | | | | | |

1-389; A-11; B-17; MS m/z 447 (M + H)⁺



| 1-390; | A-11; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
|--------|---------------------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-391; | A-11 ; | B-19; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-392; | A-11; | B-20; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 1-393; | A-11; | B-21; | MS m/z | 467 | (M + H) + |
| 1-394; | A-11; | B-22; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 1-395; | A-11; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-396; | A-11; | B-24; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 1-397; | A-11; | B-25; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 1-398; | A-11; | B-26; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-399; | A-11; | B-27; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-400; | A-11; | B-28; | MS m/z | 485 | (M + H) ⁺ |
| 1-401; | A-11; | B-29; | MS m/z | 489 | (M + H)+ |
| 1-402; | A-11; | B-30; | MS m/z | 501 | (M + H)+ |
| 1-403; | A-11; | B-31; | MS m/z | 503 | (M + H) + |
| 1-404; | A-11; | B-32; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-405; | A-11; | B-33; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-406; | A-11; | B-34; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-407; | A-11; | B-35; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-408; | A-11; | B-36; | MS m/z | 547 | (M + H) + |
| 1-409; | A-12; | B-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 1-410; | A-12; | B-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-411; | A-12; | B-03; | MS m/z | 367 | $(M + H)^+$ |
| 1-412; | A-12 _. ; | B-04; | MS m/z | 425 | (M + H) ⁺ |
| 1-413; | A-12; | B-05; | MS m/z | 437 | (M + H) ⁺ |
| 1-414; | A-12; | B-06; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-415; | A-12; | B-07; | MS m/z | 457 | (M + H) ⁺ |
| 1-416; | A-12; | B-08; | MS m/z | 463 | (M + H) ⁺ |
| 1-417; | A-12; | B-09; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 1-418; | A-12; | B-10; | MS m/z | 487 | (M + H) + |

| 1-419; | A-12; | B-11; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|---------------------|--------|-----|---------------|
| 1-420; | A-12; | B-12; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 1-421; | A-12; | B-13; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 1-422; | A-12; | B-14; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-423; | A-12; | B-15; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-424; | A-12; | B-16; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-425; | A-12; | B-17; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-426; | A-12; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-427; | A-12; | B-19; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-428; | -A-12; | B-20; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-429; | A-12; | B-21; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 1-430; | A-12; | B-22; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-431; | A-12; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-432; | A-12; | B-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-433; | A-12; | B-25; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-434; | A-12; | B-26; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-435; | A-12; | B-27; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-436; | A-12; | B-28; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 1-437; | A-12; | B-29; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-438; | A-12; | B-30; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-439; | A-12; | B-31 _. ; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 1-440; | A-12; | B-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-441; | A-12; | B-33; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-442; | A-12; | B-34; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-443; | A-12; | B-35; | MS m/z | 529 | (M + H) + |
| 1-444; | A-12; | B-36; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 1-445; | A-13; | B-01; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 1-446; | A-13; | B-02; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-448; | A-13; | B-03; | MS m/z | 375 | $(M + H)^*$ |

| 1-449; | A-13; | B-04; | MS m/z | 433 | $(M + H)^{+}$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-450; | A-13; | B-05; | MS m/z | 445 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-451; | A-13; | B-06; | MS m/z | 485 | (M + H)+ |
| 1-452; | A-13; | B-07; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 1-453; | A-13; | B-08; | MS m/z | 471 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-454; | A-13; | B-09; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 1-455; | A-13; | B-10; | MS m/z | 495 | (M + H) + |
| 1-456; | A-13; | B-11; | MS m/z | 499 | (M + H) + |
| 1-457; | A-13; | B-12; | MS m/z | 507 | (M + H)+ |
| 1-458; | A-13; | B-13; | MS m/z | 421 | (M + H) + |
| 1-459; | A-13; | B-14; | MS m/z | 429 | (M + H) + |
| 1-460; | A-13; | B-15; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-461; | A-13; | B-16; | MS m/z | 449 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-462; | A-13; | B-17; | MS m/z | 455 | (M + H)+ |
| 1-463; | A-13; | B-18; | MS m/z | 459 | (M + H)+ |
| 1-464; | A-13; | B-19; | MS m/z | 469 | (M + H) ⁺ |
| 1-465; | A-13; | B-20; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 1-466; | A-13; | B-21; | MS m/z | 475 | (M + H) + |
| 1-467; | A-13; | B-22; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-468; | A-13; | B-23; | MS m/z | 491 | (M + H) + |
| 1-469; | A-13; | B-24; | MS m/z | 491 | (M + H), |
| 1-470; | A-13; | B-25; | MS m/z | 460 | (M + H), |
| 1-471; | A-13; | B-26; | MS m/z | 500 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-472; | A-13; | B-27; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-473; | A-13; | B-28; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 1-474; | A-13; | B-29; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 1-475; | A-13; | B-30; | MS m/z | 509 | $(M + H)_+$ |
| 1-476; | A-13; | B-31; | MS m/z | 511 | (M + H)+ |
| 1-477; | A-13; | B-32; | MS m/z | 513 | (M + H)+ |
| | | | | | |



| 1-478; | A-13; | B-33; | MS m/z | 513 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-479; | A-13; | B-34; | MS m/z | 523 | (M + H) + |
| 1-480; | A-13; | B-35; | MS m/z | 537 | (M + H)+ |
| 1-481; | A-13; | B-36; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 1-482; | A-13; | B-37; | MS m/z | 415 | (M + H) + |
| 1-483; | A-13; | B-38; | MS m/z | 429 | (M + H) ⁺ |
| 1-484; | A-13; | B-39; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-485; | A-13; | B-40; | MS m/z | 431 | (M + H) ⁺ |
| 1-486; | A-13; | B-41; | MS m/z | 403 | (M + H)+ |
| 1-487; | A-13; | B-42; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 1-488; | A-13; | B-43; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 1-489; | A-13; | B-44; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 1-490; | A-13; | B-45; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 1-491; | A-13; | B-46; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 1-492; | A-13; | B-47; | MS m/z | 445 | (M + H) + |
| 1-493; | A-14; | B-01; | MS m/z | 413 | (M + H)+ |
| 1-494; | A-14; | B-02; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| 1-495; | A-14; | B-03; | MS m/z | 375 | (M + H) + |
| 1-496; | A-14; | B-04; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 1-497; | A-14; | B-05; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 1-498; | A-14; | B-06; | MS m/z | 485 | (M + H) + |
| 1-499; | A-14; | B-07; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 1-500; | A-14; | B-08; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 1-501; | A-14; | B-09; | MS m/z | 473 | (M + H) + |
| 1-502; | A-14; | B-10; | MS m/z | 495 | (M + H) + |
| 1-503; | A-14; | B-11; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
| 1-504; | A-14; | B-12; | MS m/z | 507 | (M + H) + |
| 1-505; | A-14; | B-13; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-506; | A-14; | B-14; | MS m/z | 429 | (M + H) + |
| | | | | | |

1-531;

A-15;

| 1-507; | A-14; | B-15; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
|--------|----------|-------|---------|-----|-------------|
| 1-508; | A-14; | B-16; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-509; | A-14; | B-17; | MS m/z | 455 | (M + H)+ |
| 1-510; | A-14; | B-18; | .MS m/z | 459 | (M + H)+ |
| 1-511; | A-14; | B-19; | MS m/z | 469 | (M + H)+ |
| 1-512; | A-14; | B-20; | MS m/z | 471 | (M + H) + |
| 1-513; | A-14; | B-21; | MS m/z | 475 | (M + H) + |
| 1-514; | A-14; | B-22; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-515; | A-14; | B-23; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 1-516; | - A-14·; | B-24; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-517; | A-14; | B-25; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 1-518; | A-14; | B-26; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-519; | A-14; | B-27; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
| 1-520; | A-14; | B-28; | MS m/z | 493 | (M + H)+ |
| 1-521; | A-14; | B-29; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 1-522; | A-14; | B-30; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-523; | A-14; | B-31; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 1-524; | A-14; | B-32; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 1-525; | A-14; | B-33; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 1-526; | A-14; | B-34; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 1-527; | A-14; | B-35; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 1-528; | A-14; | B-36; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 1-529; | A-15; | B-01; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-530; | A-15; | B-02; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |

MS m/z383 $(M + H)^+$ 1-532; A-15; B-04; MS m/z441 $(M + H)^+$ 1-533; A-15; MS m/z $(M + H)^+$ B-05; 453 1-534; A-15; B-06; MS m/z493 $(M + H)^+$ 1-535; A-15; B-07; $(M + H)^+$ MS m/z473

B-03;



| 1-536; | A-15; | B-08; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|------------------------|
| 1-537; | A-15; | B-09; | MS m/z | 481 | (M + H)+ |
| 1-538; | A-15; | B-10; | MS m/z | 503 | (M + H)+ |
| 1-539; | A-15; | B-11; | MS m/z | 507 | (M + H)+ |
| 1-540; | A-15; | B-12; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-541; | A-15; | B-13; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-542; | A-15; | B-14; | MS m/z | 437 | (M + H) ⁺ |
| 1-543; | A-15; | B-15; | MS m/z | 451 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-544; | A-15; | B-16; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-545; | A-15; | B-17; | MS m/z | 463 | (M + H) + |
| 1-546; | A-15; | B-18; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 1-547; | A-15; | B-19; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-548; | A-15; | B-20; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-549; | A-15; | B-21; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 1-550; | A-15; | B-22; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-551; | A-15; | B-23; | MS m/z | 499 | (M + H) ⁺ . |
| 1-552; | A-15; | B-24; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
| 1-553; | A-15; | B-25; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 1-554; | A-15; | B-26; | MS m/z | 508 | (M + H)+ |
| 1-555; | A-15; | B-27; | MS m/z | 508 | (M + H)+ |
| 1-556; | A-15; | B-28; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-557; | A-15; | B-29; | MS m/z | 505 | (M + H) ⁺ |
| 1-558; | A-15; | B-30; | MS m/z | 517 | (M + H)+ |
| 1-559; | A-15; | B-31; | MS m/z | 519 | (M + H) ⁺ |
| 1-560; | A-15; | B-32; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-561; | A-15; | B-33; | MS m/z | 521 | (M + H) + |
| 1-562; | A-15; | B-34; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 1-563; | A-15; | B-35; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 1-564; | A-15; | B-36; | MS m/z | 563 | $(M + H)^+$ |



| | | | | | • |
|--------|-------|-------|---------|--------------|---------------|
| 1-565; | A-16; | B-01; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 1-566; | A-16; | B-02; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-567; | A-16; | B-03; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 1-568; | A-16; | B-04; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-569; | A-16; | B-05; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-570; | A-16; | B-06; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 1-571; | A-16; | B-07; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-572; | A-16; | B-08; | MS m/z | 485 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-573; | A-16; | B-09; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-574; | A-16; | B-10; | MS m/z | 509 | (M + H) + |
| 1-575; | A-16; | B-11; | ·MS m/z | 513 | (M + H) + |
| 1-576; | A-16; | B-12; | MS m/z | 521 | (M + H)* |
| 1-577; | A-16; | B-13; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-578; | A-16; | B-14; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-579; | A-16; | B-15; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-580; | A-16; | B-16; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-581; | A-16; | B-17; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 1-582; | A-16; | B-18; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 1-583; | A-16; | B-19; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-584; | A-16; | B-20; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 1-585; | A-16; | B-21; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-586; | A-16; | B-22; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 1-587; | A-16; | B-23; | MS m/z | 505. | $(M + H)^+$ |
| 1-588; | A-16; | B-24; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-589; | A-16; | B-25; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 1-590; | A-16; | B-26; | MS m/z | · 514 | $(M + H)^+$ |
| | | | MS m/z | | |
| 1-592; | A-16; | B-28; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 1-593; | A-16; | B-29; | MS m/z | 511 | $(M + H)^{+}$ |
| | | | | | |

| 1-594; | A-16; | B-30; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|--------|-------|---------------|
| 1-595; | A-16; | B-31; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 1-596; | A-16; | B-32; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 1-597; | A-16; | B-33; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 1-598; | A-16; | B-34; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 1-599; | A-16; | B-35; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 1-600; | A-16; | B-36; | MS m/z | 569 | $(M + H)^+$ |
| 1-601; | A-17; | B-01; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 1-602; | A-17; | B-02; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 1-603; | A-17; | B-03; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 1-604; | A-17; | B-04; | MS m/z | 453 | (M + H)* |
| 1-605; | A-17; | B-05; | MS m/z | 465 | (M + H) * |
| 1-606; | A-17; | B-06; | MS m/z | 505 | (M + H) + |
| 1-607; | A-17; | B-07; | MS m/z | 485 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-608; | A-17; | B-08; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-609; | A-17; | B-09; | MS m/z | 493 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-610; | A-17; | B-10; | MS m/z | 515 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-611; | A-17; | B-11; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 1-612; | A-17; | B-12; | MS m/z | 527 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-613; | A-17; | B-13; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-614; | A-17; | B-14; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-615; | A-17; | B-15; | MS m/z | 463 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-616; | A-17; | B-16; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 1-617; | A-17; | B-17; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-618; | A-17 ; | B-18; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-619; | A-17; | B-19; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-620; | A-17; | B-20; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-621; | A-17; | B-21; | MS m/z | . 495 | $(M + H)^+$ |

1-622; A-17; B-22; MS m/z

499 $(M + H)^{+}$



| 1-623; | A-17; | B-23; | MS m/z | 511 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-624; | A-17; | B-24; | MS m/z | 511 | (M + H) ⁺ |
| 1-625; | A-17; | B-25; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 1-626; | A-17; | B-26; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 1-627; | A-17; | B-27; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 1-628; | A-17; | B-28; | MS m/z | 513 | (M + H) + |
| 1-629; | A-17; | B-29; | MS m/z | 517 | (M + H) ⁺ |
| 1-630; | A-17; | B-30; | MS m/z | 529 | (M + H) + |
| 1-631; | A-17; | B-31; | MS m/z | 531 | (M + H)+ |
| 1-632; | A-17; | B-32; | MS m/z | 533 | (M·+ H) ⁺ |
| 1-633; | A-17; | B-33; | MS m/z | 533 | (M + H) ⁺ |
| 1-634; | A-17; | B-34; | MS m/z | 543 | (M·+ H)+ |
| 1-635; | A-17; | B-35; | MS m/z | 557 | (M + H)+ |
| 1-636; | A-17; | B-36; | MS m/z | 575 | (M + H) + |
| 1-637; | A-18; | B-01; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-638; | A-18; | B-02; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| 1-639; | A-18; | B-03; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-640; | A-18; | B-04; | MS m/z | 469 | (M + H)+ |
| 1-641; | A-18; | B-05; | MS m/z | 481 | (M + H) + |
| 1-642; | A-18; | B-06; | MS m/z | 521 | (M + H) + |
| 1-643; | A-18; | B-07; | MS m/z | 501 | (M + H) + |
| 1-644; | A-18; | B-08; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 1-645; | A-18; | B-09; | MS m/z | 509 | (M + H) ⁺ |
| 1-646; | A-18; | B-10; | MS m/z | 531 | ·(M + H) + |
| 1-647; | A-18; | B-11; | MS m/z | 535 | (M + H) + |
| 1-648; | A-18; | B-12; | MS m/z | 543 | (M + H)+ |
| 1-649; | A-18; | B-13; | MS m/z | 457 | (M + H) + |
| 1-650; | A-18; | B-14; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 1-651; | A-18; | B-15; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |



| 1-652; | A-18; | B-16; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-653; | A-18; | B-17; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-654; | A-18; | B-18; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 1-655; | A-18; | B-19; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-656; | A-18; | B-20; | MS m∕z | 507 | (M + H)+ |
| 1-657; | A-18; | B-21; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 1-658; | A-18; | B-22; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-659; | A-18; | B-23; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 1-660; | A-18; | B-24; | MS m/z | 527 | (M + H)+ |
| 1-661; | A−18; | B-25; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 1-662; | A-18; | B-26; | MS m/z | 536 | (M + H) ⁺ |
| 1-663; | A-18; | B-27; | MS m/z | 536 | (M + H)+ |
| 1-664; | A-18; | B-28; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-665; | A-18; | B-29; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 1-666; | A-18; | B-30; | MS m/z | 545 | (M + H)+ |
| 1-667; | A-18; | B-31; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 1-668; | A-18; | B-32; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 1-669; | A-18; | B-33; | MS m/z | 549 | (M + H) + |
| 1-670; | A-18; | B-34; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 1-671; | A-18; | B-35; | MS m/z | 573 | (M + H)* |
| 1-672; | A-18; | B-36; | MS m/z | 591 | $(M + H)^*$ |
| 1-673; | A-19; | B-01; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-674; | A-19; | B-02; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-675; | A-19; | B-03; | MS m/z | 387 | $(M + H)^+$ |
| 1-676; | A-19; | B-04; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-677; | A-19; | B-05; | MS m/z | 457 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-678; | A-19; | B-06; | MS m/z | 497 | (M + H) + |
| 1-679; | A-19; | B-07; | MS m/z | 477 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-680; | A-19; | B-08; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| | | | | | |

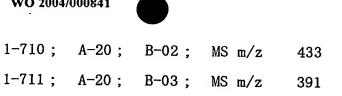


| 1-681; | A-19; | B-09; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-682; | A-19; | B-10; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 1-683; | A-19; | B-11; | MS m/z | 511 | (M + H)+ |
| 1-684; | A-19; | B-12; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 1-685; | A-19; | B-13; | MS m/z | 433 | (M + H)+ |
| 1-686; | A-19; | B-14; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-687; | A-19; | B-15; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 1-688; | A-19; | B-16; | MS m/z | 461 | (M + H)* |
| 1-689; | A-19; | B-17; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 1-690; | A-19; | B-18; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 1-691; | A-19; | B-19; | MS m/z | 481 | (M .+ H)+ |
| 1-692; | A-19; | B-20; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-693; | A-19; | B-21; | MS m/z | 487 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-694; | A-19; | B-22; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-695; | A-19; | B-23; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 1-696; | A-19; | B-24; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 1-697; | A-19; | B-25; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 1-698; | A-19; | B-26; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 1-699; | A-19; | B-27; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 1-700; | A-19; | B-28; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 1-701; | A-19; | B-29; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-702; | A-19; | B-30; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-703; | A-19; | B-31; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 1-704; | A-19; | B-32; | MS m/z | 525 | (M + H)+ |
| 1-705; | A-19; | B-33; | MS m/z | 525 | (M + H)+ |
| 1-706; | A-19; | B-34; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 1-707; | A-19; | B-35; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 1-708; | A-19; | B-36; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 1-709; | A-20; | B-01; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

1-712;

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$



1-712; A-20; B-04; MS m/z 449
$$(M + H)^+$$

1-713; A-20; B-05; MS m/z 461 $(M + H)^+$

$$1-714$$
; A-20; B-06; MS m/z 501 (M + H)⁺

$$1-714$$
; A-20; B-06; MS m/z 501 (M + H)⁺

$$1-715$$
; A-20; B-07; MS m/z 481 (M + H)⁺

$$1-716$$
; A-20; B-08; MS m/z 487 (M + H)⁺

$$1-717$$
; A-20; B-09; MS m/z 489 (M + H)⁺

$$1-718$$
; A-20; B-10; MS m/z 511 (M + H)⁺

$$1-719$$
; A-20; B-11; MS m/z 515 (M + H)⁺

$$1-720$$
; $A-20$; $B-12$; $MS m/z$ 523 $(M + H)^+$

$$1-721$$
; A-20; B-13; MS m/z 437 (M + H)⁺

$$1-722$$
; A-20; B-14; MS m/z 445 (M + H)⁺

$$1-723$$
; A-20; B-15; MS m/z 459 (M + H)⁺

$$1-724$$
; A-20; B-16; MS m/z 465 (M + H)⁺

$$1-725$$
; $A-20$; $B-17$; $MS m/z$ 471 $(M + H)^+$

$$1-726$$
; A-20; B-18; MS m/z 475 (M + H)⁺

$$1-727$$
; A-20; B-19; MS m/z 485 (M + H)⁺

$$1-728$$
; A-20; B-20; MS m/z 487 (M + H)⁺

$$1-729$$
; A-20; B-21; MS m/z 491 (M + H)⁺

$$1-730$$
; A-20; B-22; MS m/z 495 (M + H)⁺

1-731; A-20; B-23; MS m/z 507
$$(M + H)^+$$

$$1-732$$
; A-20; B-24; MS m/z 507 (M + H)⁺

$$1-733$$
; A-20; B-25; MS m/z 476 (M + H)⁺

$$1-734$$
; A-20; B-26; MS m/z 516 (M + H)⁺

$$1-735$$
; A-20; B-27; MS m/z 516 (M + H)⁺

1-736; A-20; B-28; MS m/z 509
$$(M + H)^+$$

$$1-737$$
; A-20; B-29; MS m/z 513 (M + H)⁺

$$1-738$$
; A-20; B-30; MS m/z 525 (M + H)⁺

| 1-739; | A-20; | B-31; | MS m/z | 527 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-740; | A-20; | B-32; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-741; | A-20; | B-33; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-742; | A-20; | B-34; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 1-743; | A-20; | B-35; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 1-744; | A-20; | B-36; | MS m/z | 571 | (M + H)+ |
| 1-745; | A-21; | B-01; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-746; | A-21; | B-02; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 1-747; | A-21; | B-03; | MS m/z | 397 | $(M + H)^+$ |
| 1-748; | A-21; | B-04; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 1-749; | A-21; | B-05; | MS m/z | 467 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-750; | A-21; | B-06; | MS m/z | 507 | (M + H) + |
| 1-751; | A-21; | B-07; | MS m/z | 487 | (M + H) + |
| 1-752; | A-21; | B-08; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 1-753; | A-21; | B-09; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 1-754; | A-21; | B-10; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 1-755; | A-21; | B-11; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-756; | A-21; | B-12; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-757; | A-21; | B-13; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-758; | A-21; | B-14; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-759; | A-21; | B-15; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-760; | A-21; | B-16; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-761; | A-21; | B-17; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-762; | A-21; | B-18; | MS m/z | 481 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-763; | A-21; | B-19; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-764; | A-21; | B-20; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 1-765; | A-21; | B-21; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 1-766; | A-21; | B-22; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-767; | A-21; | B-23; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |



| 1-768; | A-21; | B-24; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|----------------|-----|---------------|
| 1-769; | A-21; | B-25; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 1-770; | A-21; | B-26; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-771; | A-21; | B-27; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-772; | A-21; | B-28; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-773; | A-21; | B-29; | MS m/z | 519 | (M + H)+ |
| 1-774; | A-21; | B-30; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 1-775; | A-21; | B-31; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 1-776; | A-21; | B-32; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 1-777; | A-21; | B-33; | $MS \cdot m/z$ | 535 | (M + H)+ |
| 1-778; | A-21; | B-34; | MS m/z | 545 | (M + H)+ |
| 1-779; | A-21; | B-35; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 1-780; | A-21; | B-36; | MS m/z | 577 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-781; | A-22; | B-01; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-782; | A-22; | B-02; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-783; | A-22; | B-03; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-784; | A-22; | B-04; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-785; | A-22; | B-05; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-786; | A-22; | B-06; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 1-787; | A-22; | B-07; | MS m/z | 511 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-788; | A-22; | B-08; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 1-789; | A-22; | B-09; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 1-790; | A-22; | B-10; | MS m/z | 541 | (M + H) + |
| 1-791; | A-22; | B-11; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 1-792; | A-22; | B-12; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 1-793; | A-22; | B-13; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 1-794; | A-22; | B-14; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-795; | A-22; | B-15; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-796; | A-22; | B-16; | MS m/z | 495 | (M + H)+ |
| | | | | | |



| 1-797; | A-22; | B-17; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-798; | A-22; | B-18; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-799; | A-22; | B-19; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-800; | A-22; | B-20; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 1-801; | A-22; | B-21; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-802; | A-22 ; | B-22; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 1-803; | A-22; | B-23; | MS m/z | 537 | (M + H)* |
| 1-804; | A-22; | B-24; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 1-805; | A-22; | B-25; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 1-806; | A-22; | B-26; | MS m/z | 546 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-807; | A-22; | B-27; | MS m/z | 546 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-808; | A-22; | B-28; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 1-809; | A-22; | B-29; | MS m/z | 543 | $(M + H)^+$ |
| 1-810; | A-22; | B-30; | MS m/z | 555 | (M + H) + |
| 1-811; | A-22; | B-31; | MS m/z | 557 | $(M + H)^+$ |
| 1-812; | A-22; | B-32; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 1-813; | A-22; | B-33; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 1-814; | A-22; | B-34; | MS m/z | 569 | $(M + H)^+$ |
| 1-815; | A-22; | B-35; | MS m/z | 583 | $(M + H)^+$ |
| 1-816; | A-22; | B-36; | MS m/z | 601 | $(M + H)^+$ |
| 1-817; | A-23; | B-01; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-818; | A-23; | B-02; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 1-819; | A-23; | B-03; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-820; | A-23; | B-04; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-821; | A-23; | B-05; | MS m/z | 495 | (M + H)+' |
| 1-822; | A-23; | B-06; | MS m/z | 535 | (M + H)+ |
| 1-823; | A-23; | B-07; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-824; | A-23; | B-08; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-825; | A-23; | B-09; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |



| 1-826; | A-23; | B-10; | MS m/z | 545 | (M + H)* |
|--------|-------|-------|--------|-------|----------------------|
| 1-827; | A-23; | B-11; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 1-828; | A-23; | B-12; | MS m/z | 557 | $(M + H)^+$ |
| 1-829; | A-23; | B-13; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-830; | A-23; | B-14; | MS m/z | 479 | (M + H) ⁺ |
| 1-831; | A-23; | B-15; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 1-832; | A-23; | B-16; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 1-833; | A-23; | B-17; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-834; | A-23; | B-18; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-835; | A-23; | B-19; | MS m/z | 519 | (M + H)+ |
| 1-836; | A-23; | B-20; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-837; | A-23; | B-21; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 1-838; | A-23; | B-22; | MS m/z | 529 | (M + H) + |
| 1-839; | A-23; | B-23; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 1-840; | A-23; | B-24; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 1-841; | A-23; | B-25; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 1-842; | A-23; | B-26; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 1-843; | A-23; | B-27; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 1-844; | A-23; | B-28; | MS m/z | 543 | $(M + H)^+$ |
| 1-845; | A-23; | B-29; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 1-846; | A-23; | B-30; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 1-847; | A-23; | B-31; | MS m/z | 561 | $(M + H)^+$ |
| 1-848; | A-23; | B-32; | MS m/z | 563 | $(M + H)^+$ |
| 1-849; | A-23; | B-33; | MS m/z | 563 | $(M + H)^+$ |
| 1-850; | A-23; | B-34; | MS m/z | 573 | (M + H)+ |
| 1-851; | A-23; | B-35; | MS m/z | 587 | (M + H) ⁺ |
| 1-852; | A-23; | B-36; | MS m/z | 605 . | $(M + H)^+$ |
| 1-853; | A-24; | B-01; | MS m/z | 467 | (M + H) ⁺ |
| 1-854; | A-24; | B-02; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |



| 1-855; | A-24; | B-03; | MS m/z | 429 | (M + H) + |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-856; | A-24; | B-04; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-857; | A-24; | B-05; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
| 1-858; | A-24; | B-06; | MS m/z | 539 | (M + H) + |
| 1-859; | A-24; | B-07; | MS m/z | 519 | (M + H)+ |
| 1-860; | A-24; | B-08; | MS m/z | 525 | (M + H) + |
| 1-861; | A-24; | B-09; | MS m/z | 527 | (M + H)+ |
| 1-862; | A-24; | B-10; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 1-863; | A-24; | B-11; | MS m/z | 553 | (M + H) ⁺ |
| 1-864; | A-24; | B-12; | MS m/z | 561 | (M + H) + |
| 1-865; | A-24; | B-13; | MS m/z | 475 | (M + H) + |
| 1-866; | A-24; | B-14; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 1-867; | A-24; | B-15; | MS m/z | 497 | (M + H)+ |
| 1-868; | A-24; | B-16; | MS m/z | 503 | (M + H) + |
| 1-869; | A-24; | B-17; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-870; | A-24; | B-18; | MS m/z | 513 | (M + H)+ |
| 1-871; | A-24; | B-19; | MS m/z | 523 | (M + H) + |
| 1-872; | A-24; | B-20; | MS m/z | 525 | (M + H)+ |
| 1-873; | A-24; | B-21; | MS m/z | 529 | (M + H)+ |
| 1-874; | A-24; | B-22; | MS m/z | 533 | (M + H)+ |
| 1-875; | A-24; | B-23; | MS m/z | 545 | (M + H)+ |
| 1-876; | A-24; | B-24; | MS m/z | 545 | (M + H)+ |
| 1-877; | A-24; | B-25; | MS m/z | 514 | (M + H)+ |
| 1-878; | A-24; | B-26; | MS m/z | 554 | (M + H)+ |
| 1-879; | A-24; | B-27; | MS m/z | 554 | (M + H)+ |
| 1-880; | A-24; | B-28; | MS m/z | 547 | (M + H)+ |
| 1-881; | A-24; | B-29; | MS m/z | 551 | (M + H)+ |
| 1-882; | A-24; | B-30; | MS m/z | 563 | (M + H)+ |
| 1-883; | A-24; | B-31; | MS m/z | 565 | (M + H) + |
| | | | | | - |

| 1-884; | A-24; | B-32; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-885; | A-24; | B-33; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 1-886; | A-24; | B-34; | MS m/z | 577 | $(M + H)^+$ |
| 1-887; | A-24; | B-35; | MS m/z | 591 | (M + H) ⁺ |
| 1-888; | A-24; | B-36; | MS m/z | 609 | (M + H) * |
| 1-889; | A-25; | B-01; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 1-890; | A-25; | B-02; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 1-891; | A-25; | B-03; | MS m/z | 356 | (M + H)+ |
| 1-892; | A-25; | B-04; | MS m/z | 414 | $(M + H)^+$ |
| 1-893; | A-25; | B-05; | MS m/z | 426 | (M + H) + |
| 1-894; | A-25; | B-06; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 1-895; | A-25; | B-07; | MS m/z | 456 | (M + H) + |
| 1-896; | A-25; | B-08; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 1-897; | A-25; | B-09; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 1-898; | A-25; | B-10; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 1-899; | A-25; | B-11; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-900; | A-25; | B-12; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 1-901; | A-25; | B-13; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 1-902; | A-25; | B-14; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 1-903; | A-25; | B-15; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 1-904; | A-25; | B-16; | MS m/z | 430 | (M + H)+ |
| 1-905; | A-25; | B-17; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 1-906; | A-25; | B-18; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 1-907; | A-25; | B-19; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 1-908; | A-25; | B-20; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-909; | A-25; | B-21; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 1-910; | A-25; | B-22; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 1-911; | A-25; | B-23; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 1-912; | A-25; | B-24; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

1-925;

1-926;

A-26;

A-26;

B-01;

B-02;

| W O 2004/ | 000041 | | | | |
|-----------|--------|-------|----------|-----|-------------|
| 1-913; | A-25; | B-25; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-914; | A-25; | B-26; | MS m/z . | 481 | $(M + H)^+$ |
| 1-915; | A-25; | B-27; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 1-916; | A-25; | B-28; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 1-917; | A-25; | B-29; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-918; | A-25; | B-30; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 1-919; | A-25; | B-31; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-920; | A-25; | B-32; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 1-921; | A-25; | B-33; | MS m/z | 494 | (M + H).+ |
| 1-922; | A-25; | B-34; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 1-923; | A-25; | B-35; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 1-924; | A-25; | B-36; | MS m/z | 536 | $(M + H)^+$ |

MS m/z

MS m/z

400

404

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

| 1-942; | A-26; | B-18; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-943; | A-26; | B-19; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 1-944; | A-26; | B-20; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 1-945; | A-26; | B-21; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 1-946; | A-26; | B-22; | MS m/z | 466 | (M + H) + |
| 1-947; | A-26; | B-23; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-948; | A-26; | B-24; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-949; | A-26; | B-25; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-950; | A¬26; | B-26; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 1-951; | A-26; | B-27; | MS m/z | 487 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-952; | A-26; | B-28; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-953; | A-26; | B-29; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 1-954; | A-26; | B-30; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 1-955; | A-26; | B-31; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 1-956; | A-26; | B-32; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-957; | A-26; | B-33; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-958; | A-26; | B-34; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 1-959; | A-26; | B-35; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 1-960; | A-26; | B-36; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 1-961; | A-27; | B-01; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 1-962; | A-27; | B-02; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 1-963; | A-27; | B-03; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 1-964; | A-27; | B-04; | MS m/z | 454 | (M + H)+ |
| 1-965; | A-27; | B-05; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 1-966; | A-27; | B-06; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 1-967; | A-27; | B-07; | MS m/z | 486 | (M + H)+ |
| 1-968; | A-27; | B-08; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-969; | A-27; | B-09; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 1-970; | A-27; | B-10; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 1-971; | A-27; | B-11; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-972; | A-27; | B-12; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 1-973; | A-27; | B-13; | MS m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 1-974; | A-27; | B-14; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 1-975; | A-27; | B-15; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 1-976; | A-27; | B-16; | MS m/z | 470 | (M + H)+ |
| 1-977; | A-27; | B-17; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
| 1-978; | A-27; | B-18; | MS m/z | 480 | (M + H)+ |
| 1-979; | A-27; | B-19; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 1-980; | A-27; | B-20; | MS m/z | 492 | (M + H) + |
| 1-981; | A-27; | B-21; | MS m/z | 496 | (M + H) + |
| 1-982; | A-27; | B-22; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-983; | A-27; | B-23; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 1-984; | A-27; | B-24; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 1-985; | A-27; | B-25; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 1-986; | A-27; | B-26; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-987; | A-27; | B-27; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 1-988; | A-27; | B-28; | MS m/z | 514 | (M + H)+ |
| 1-989; | A-27; | B-29; | MS m/z | 518 | (M + H)+ |
| 1-990; | A-27; | B-30; | MS m/z | 530 | (M + H) + |
| 1-991; | A-27; | B-31; | MS m/z | 532 | (M + H)+ |
| 1-992; | A-27; | B-32; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 1-993; | A-27; | B-33; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 1-994; | A-27; | B-34; | MS m/z | 544 | (M + H)+ |
| 1-995; | A-27; | B-35; | MS m/z | 558 | (M + H) + |
| 1-996; | A-27; | B-36; | MS m/z | 576 | $(M + H)^+$ |
| 1-997; | A-28; | B-01; | MS m/z | 464 | (M + H)+ |
| 1-998; | A-28; | B-02; | MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 1-999; | A-28; | B-03; | MS m/z | 426 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 1-1000; | A-28; | B-04; | MS m/z | 484 | (M + H)* |
|---------|-------|-------|----------|-----|----------------------|
| 1-1001; | A-28; | B-05; | MS m/z | 496 | (M + H)+ |
| 1-1002; | A-28; | B-06; | MS m/z | 536 | (M + H)+ |
| 1-1003; | A-28; | B-07; | MS m/z | 516 | (M + H)+ |
| 1-1004; | A-28; | B-08; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-1005; | A-28; | B-09; | MS m/z | 524 | (M + H)+ |
| 1-1006; | A-28; | B-10; | MS m/z | 546 | (M + H)+ |
| 1-1007; | A-28; | B-11; | MS m/z | 550 | (M + H)+ |
| 1-1008; | A-28; | B-12; | MS m/z | 558 | (M + H) + |
| 1-1009; | A-28; | B-13; | MS m/z | 472 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1010; | A-28; | B-14; | MS m/z | 480 | (M + H)+ |
| 1-1011; | A-28; | B-15; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 1-1012; | A-28; | B-16; | MS m/z | 500 | (M + H)+ |
| 1-1013; | A-28; | B-17; | MS m/z | 506 | (M + H)+ |
| 1-1014; | A-28; | B-18; | MS m/z | 510 | (M + H)+ |
| 1-1015; | A-28; | B-19; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 1-1016; | A-28; | B-20; | MS m/z | 522 | (M + H)+ |
| 1-1017; | A-28; | B-21; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 1-1018; | A-28; | B-22; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| 1-1019; | A-28; | B-23; | MS m/z | 542 | (M + H) ⁺ |
| 1-1020; | A-28; | B-24; | MS m/z | 542 | (M + H)+ |
| 1-1021; | A-28; | B-25; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 1-1022; | A-28; | B-26; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 1-1023; | A-28; | B-27; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 1-1024; | A-28; | B-28; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 1-1025; | A-28; | B-29; | MS m/z . | 548 | $(M + H)^+$ |
| 1-1026; | A-28; | B-30; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 1-1027; | A-28; | B-31; | MS m/z | 562 | (M + H)+ |
| 1-1028; | A-28; | B-32; | MS m/z | 564 | $(M + H)^{+}$ |



| 1-1029 • | A-28 · | B-33 · | MS m/z | 564 | $(M + H)^{+}$ |
|----------|--------|--------|--------|-----|---------------|
| 1 1023, | л ΔО, | D-33 ; | M2 m/z | 204 | (N + H) |

$$1-1030$$
; A-28; B-34; MS m/z 574 (M + H)⁺

$$1-1031$$
; A-28; B-35; MS m/z 588 (M + H)⁺

$$1-1032$$
; A-28; B-36; MS m/z 606 (M + H)⁺

$$1-1035$$
; A-29; B-03; MS m/z 368 (M + H)⁺

$$1-1038$$
; $A-29$; $B-06$ ·

$$1-1049$$
; A-29; B-17; MS m/z 448 (M + H)⁺

$$1-1054$$
; A-29; B-22; MS m/z 472 (M + H)⁺

1-1084;

1-1085;

1-1086;

A-30; B-16;

B-17;

B-18;

A-30;

A-30;

| 1-1058; | A-29; | B-26 | | | |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-1059; | A-29; | B-27 | | | |
| 1-1060; | A-29; | B-28 | | | |
| 1-1061; | A-29; | B-29 | | | |
| 1-1062; | A-29; | B-30 | | | |
| 1-1063; | A-29; | B-31 | | | |
| 1-1064; | A-29; | B-32 | | | |
| 1-1065; | A-29; | B-33 | | • | |
| 1-1066; | A-29; | B-34 | | | |
| 1-1067; | A-29; | B-35 | | | |
| 1-1068; | A-29; | B-36 | | | |
| 1-1069; | A-30; | B-01; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 1-1070; | A-30; | B-02; | MS m/z | 426 | $(M + H)^+$ |
| 1-1071; | A-30; | B-03; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 1-1072; | A-30; | B-04; | MS m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 1-1073; | A-30; | B-05; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 1-1074; | A-30; | B-06; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 1-1075; | A-30; | B-07; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 1-1076; | A-30; | B-08; | MS m/z | 480 | (M + H)+ |
| 1-1077; | A-30; | B-09; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 1-1078; | A-30; | B-10; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 1-1079; | A-30; | B-11; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 1-1080; | A-30; | B-12; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 1-1081; | A-30; | B-13; | MS m/z | 430 | $(M + H)^+$ |
| 1-1082; | A-30; | B-14; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 1-1083; | A-30; | B-15; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |

458

464

468

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^{+}$

 $(M + H)^+$

MS m/z

MS m/z

MS m/z

1-1115; A-31; B-11

| 1-1087; | A-30; | B-19; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1088; | A-30; | B-20; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-1089; | A-30; | B-21; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 1-1090; | A-30; | B-22; | MS m/z | 488 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1091; | A-30; | B-23; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-1092; | A-30; | B-24; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-1093; | A-30; | B-25; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 1-1094; | A-30; | B-26; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-1095; | A-30; | B-27; | MS m/z | 509 | (M + H)+ |
| 1-1096; | A-30; | B-28; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 1-1097; | A-30; | B-29; | MS m/z | 506 | (M + H)+ |
| 1-1098; | A-30; | B-30; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 1-1099; | A-30; | B-31; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 1-1100; | A-30; | B-32; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-1101; | A-30; | B-33; | MS m/z | 522 | (M + H) ⁺ |
| 1-1102; | A-30; | B-34; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 1-1103; | A-30; | B-35; | MS m/z | 546 | (M + H) + |
| 1-1104; | A-30; | B-36; | MS m/z | 564 | $(M + H)^+$ |
| 1-1105; | A-31; | B-01 | | | |
| 1-1106; | A-31; | B-02 | | | · |
| 1-1107; | A-31; | B-03; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 1-1108; | A-31; | B-04 | | | |
| 1-1109; | A-31; | B-05 | | | |
| 1-1110; | A-31; | B-06 | | | |
| 1-1111; | A-31; | B-07 | | | |
| 1-1112; | A-31; | B-08 | | | |
| 1-1113; | A-31; | B-09 | | | |
| 1-1114; | A-31; | B-10; | MS m/z | 504 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| | | - | | | |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-1116; | A-31; | B-12; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 1-1117; | A-31; | B-13 | | | |
| 1-1118; | A-31; | B-14; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 1-1119; | A-31; | B-15; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-1120; | A-31; | B-16; | MS m/z | 458 | (M + H)+ |
| 1-1121; | A-31; | B-17; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 1-1122; | A-31; | B-18; | MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 1-1123; | A-31; | B-19 | | | |
| 1-1124; | A-31; | B-20; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-1125; | A-31; | B-21; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 1-1126; | A-31; | B-22; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 1-1127; | A-31; | B-23; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-1128; | A-31; | B-24; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-1129; | A-31; | B-25 | | | |
| 1-1130; | A-31; | B-26; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 1-1131; | A-31; | B-27; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 1-1132; | A-31; | B-28; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 1-1133; | A-31; | B-29; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 1-1134; | A-31; | B-30; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 1-1135; | A-31; | B-31; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 1-1136; | A-31; | B-32; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-1137; | A-31; | B-33; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 1-1138; | A-31; | B-34; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 1-1139; | A-31; | B-35; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 1-1140; | A-31; | B-36; | MS m/z | 564 | $(M + H)^+$ |
| 1-1141; | A-32; | B-01; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 1-1142; | A-32; | B-02; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-1143; | A-32; | B-03; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 1-1144; | A-32; | B-04; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| | | _ | | | |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1145; | A-32; | B-05; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-1146; | A-32; | B-06; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 1-1147; | A-32; | B-07; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 1-1148; | A-32; | B-08; | MS m/z | 506 | (M + H) ⁺ |
| 1-1149; | A-32; | B-09; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 1-1150; | A-32; | B-10; | MS m/z | 530 | (M + H)+ |
| 1-1151; | A-32; | B-11; | MS m/z | 534 | (M + H) ⁺ |
| 1-1152; | A-32; | B-12; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 1-1153; | A-32; | B-13; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 1-1154; | A-32; | B-14; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 1-1155; | A-32; | B-15; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-1156; | A-32; | B-16; | MS m/z | 484 | (M + H)* |
| 1-1157; | A-32; | B-17; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 1-1158; | A-32; | B-18; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 1-1159; | A-32; | B-19; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 1-1160; | A-32; | B-20; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 1-1161; | A-32; | B-21; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 1-1162; | A-32; | B-22; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 1-1163; | A-32; | B-23; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 1-1164; | A-32; | B-24; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 1-1165; | A-32; | B-25; | MS m/z | 495 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1166; | A-32; | B-26; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 1-1167; | A-32; | B-27; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 1-1168; | A-32; | B-28; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 1-1169; | A-32; | B-29; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 1-1170; | A-32; | B-30; | MS m/z | 544 | (M + H) ⁺ |
| 1-1171; | A-32; | B-31; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 1-1172; | A-32; | B-32; | MS m/z | 548 | $(M + H)^+$ |
| 1-1173; | A-32; | B-33; | MS m/z | 548 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 1-1174; | A-32; | B-34; | MS m/z | 558 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-1175; | A-32; | B-35; | MS m/z | 572 | (M + H)+ |
| 1-1176; | A-32; | B-36; | MS m/z | 590 | (M + H)+ |
| 1-1177; | A-33; | B-01; | MS m/z | 363 | (M + H)+ |
| 1-1178; | A-33; | B-02; | MS m/z | 367 | (M + H)+ |
| 1-1179; | A-33; | B-03; | MS m/z | 325 | (M + H)+ |
| 1-1180; | A-33; | B-04; | MS m/z | 383 | (M + H)+ |
| 1-1181; | A-33; | B-05; | MS m/z | 395 | (M + H)+ |
| 1-1182; | A-33; | B-06; | MS m/z | 435 | (M + H)* |
| 1-1183; | A-33; | B-07; | MS m/z | 415 | (M + H) + |
| 1-1184; | A-33; | B-08; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-1185; | A-33; | B-09; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 1-1186; | A-33; | B-10; | MS m/z | 445 | (M + H) + |
| 1-1187; | A-33; | B-11; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-1188; | A-33; | B-12; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 1-1189; | A-33; | B-13; | MS m/z | 371 | $(M + H)^+$ |
| 1-1190; | A-33; | B-14; | MS m/z | 379 | (M + H) + |
| 1-1191; | A-33; | B-15; | MS m/z | 393 | (M + H) + |
| 1-1192; | A-33; | B-16; | MS m/z | 399 | (M + H)+ |
| 1-1193; | A-33; | B-17; | MS m/z | 405 | (M + H)+ |
| 1-1194; | A-33; | B-18; | MS m/z | 409 | (M + H)+ |
| 1-1195; | A-33; | B-19; | MS m/z | 419 | (M + H)+ |
| 1-1196; | A-33; | B-20; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-1197; | A-33; | B-21; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 1-1198; | A-33; | B-22; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-1199; | A-33; | B-23; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-1200; | A-33; | B-24; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 1-1201; | A-33; | B-25; | MS m/z | 410 | (M + H)+ |
| 1-1202; | A-33; | B-26; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |



| 1-1203: | A-33 : | B-27: | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
|---------|---------|--------|--------|-----|-------------|
| 1 1000, | 11 00 . | D 21 . | | 100 | (111 , 111) |

$$1-1204$$
; A-33; B-28; MS m/z 443 (M + H)⁺

$$1-1205$$
; A-33; B-29; MS m/z 447 (M + H)⁺

$$1-1206$$
; A-33; B-30; MS m/z 459 (M + H)⁺

$$1-1207$$
; A-33; B-31; MS m/z 461 (M + H)⁺

$$1-1208$$
; A-33; B-32; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$1-1209$$
; A-33; B-33; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$1-1210$$
; A-33; B-34; MS m/z 473 (M + H)⁺

$$1-1211$$
; A-33; B-35; MS m/z 487 (M + H)⁺

$$1-1212$$
; A-33; B-36; MS m/z 505 (M + H)⁺

$$1-1249$$
; A-35; B-01; MS m/z 391 (M + H)⁺

$$1-1250$$
; A-35; B-02; MS m/z 395 (M + H)⁺

$$1-1251$$
; A-35; B-03; MS m/z 353 (M + H)⁺

$$1-1252$$
; A-35; B-04; MS m/z 411 (M + H)⁺

$$1-1253$$
; A-35; B-05; MS m/z 423 (M + H)⁺

$$1-1254$$
; A-35; B-06; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$1-1255$$
; A-35; B-07; MS m/z 443 (M + H)⁺

$$1-1256$$
; A-35; B-08; MS m/z 449 (M + H)⁺

$$1-1257$$
; A-35; B-09; MS m/z 451 (M + H)⁺

$$1-1258$$
; A-35; B-10; MS m/z 473 (M + H)⁺

$$1-1259$$
; A-35; B-11; MS m/z 477 (M + H)⁺

$$1-1260$$
; A-35; B-12; MS m/z 485 (M + H)⁺

| 1-1261; | A-35; | B-13; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1262; | A-35; | B-14; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 1-1263; | A-35; | B-15; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-1264; | A-35; | B-16; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 1-1265; | A-35; | B-17; | MS m/z | 433 | (M + H)+ |
| 1-1266; | A-35; | B-18; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-1267; | A-35; | B-19; | MS m/z | 447 | (M + H) ⁺ |
| 1-1268; | A-35; | B-20; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-1269; | A-35; | B-21; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 1-1270; | A-35; | B-22; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1271; | A-35; | B-23; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 1-1272; | A-35; | B-24; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 1-1273; | A-35; | B-25; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 1-1274; | A-35; | B-26; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-1275; | A-35; | B-27; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 1-1276; | A-35; | B-28; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-1277; | A-35; | B-29; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1278; | A-35; | B-30; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 1-1279; | A-35; | B-31; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-1280; | A-35; | B-32; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1281; | A-35; | B-33; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1282; | A-35; | B-34; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-1283; | A-35; | B-35; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-1284; | A-35; | B-36; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 1-1285; | A-36; | B-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 1-1286; | A-36; | B-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-1287; | A-36; | B-03; | MS m/z | 367 | $(M + H)^+$ |
| 1-1288; | A-36; | B-04; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 1-1289; | A-36; | B-05; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 1-1290; | A-36; | B-06; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-1291; | A-36; | B-07; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1292; | A-36; | B-08; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1293; | A-36; | B-09; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1294; | A-36; | B-10; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 1-1295; | A-36; | B-11; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1296; | A-36; | B-12; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 1-1297; | A-36; | B-13; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 1-1298; | A-36; | B-14; | MS m/z | 421 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1299; | A-36; | B-15; | MS m/z | 435 | (M + H) + · |
| 1-1300; | A-36; | B-16; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-1301; | A-36; | B-17; | MS m/z | 447 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1302; | A-36; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-1303; | A-36; | B-19; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1304; | A-36; | B-20; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1305; | A-36; | B-21; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 1-1306; | A-36; | B-22; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-1307; | A-36; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-1308; | A-36; | B-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 1-1309; | A-36; | B-25; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-1310; | A-36; | B-26; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-1311; | A-36; | B-27; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-1312; | A-36; | B-28 | | | |
| 1-1313; | A-36; | B-29; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 1-1314; | A-36; | B-30; | MS m/z | 501 | $(M + H)_{+}$ |
| 1-1315; | A-36; | B-31; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 1-1316; | A-36; | B-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 1-1317; | A-36; | B-33; | MS m/z | 505 | $(M + H)_{+}$ |
| 1-1318; | A-36; | B-34; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |

| 1 1210 - | 4 00 | D. 05 | / | | |
|----------|-------|----------|--------|-----|----------------------|
| 1-1319; | A-36; | B-35; | | 529 | $(M + H)^+$ |
| 1-1320; | A-36; | B-36; | MS m/z | 547 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1321; | A-37; | B-01; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 1-1322; | A-37; | B-02; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-1323; | A-37; | B-03; | MS m/z | 417 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1324; | A-37; | B-04; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1325; | A−37; | B-05; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 1-1326; | A−37; | B-06; | MS m/z | 527 | (M + H)+ |
| 1-1327; | A-37; | B-07; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 1-1328; | A-37; | · B-08 ; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 1-1329; | A-37; | B-09; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 1-1330; | A-37; | B-10; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 1-1331; | A-37; | B-11; | MS m/z | 541 | (M + H) + |
| 1-1332; | A-37; | B-12; | MS m/z | 549 | (M + H) + |
| 1-1333; | A-37; | B-13; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1334; | A-37; | B-14; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 1-1335; | A-37; | B-15; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 1-1336; | A-37; | B-16; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1337; | A-37; | B-17; | MS m/z | 497 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1338; | A-37; | B-18; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 1-1339; | A-37; | B-19; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 1-1340; | A-37; | B-20; | MS m/z | 513 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1341; | A-37; | B-21; | MS m/z | 517 | (M + H) ⁺ |
| 1-1342; | A-37; | B-22; | MS m/z | 521 | (M + H)+ |
| 1-1343; | A-37; | B-23; | MS m/z | 533 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1344; | A-37; | B-24; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 1-1345; | A-37; | B-25; | MS m/z | 502 | (M + H)+ |
| 1-1346; | | | | | |
| 1-1347 ; | | | | | (M + H) ⁺ |
| | | | | | |

| 1-1348; | A-37; | B-28; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1349; | A-37; | B-29; | MS m/z | 539 | (M + H)+ |
| 1-1350; | A-37; | B-30; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 1-1351; | A-37; | B-31; | MS m/z | 553 | (M + H) + |
| 1-1352; | A-37; | B-32; | MS m/z | 555 | (M + H)+ |
| 1-1353; | A-37; | B-33; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 1-1354; | A-37; | B-34; | MS m/z | 565 | $(M + H)^+$ |
| 1-1355; | A-37; | B-35; | MS m/z | 579 | $(M + H)^+$ |
| 1-1356; | A-37; | B-36; | MS m/z | 597 | (M + H) + |
| 1-1357; | A-38; | B-01; | MS m/z | 392 | (M + H) + ·· |
| 1-1358; | A-38; | B-02; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 1-1359; | A-38; | B-03; | MS m/z | 354 | $(M + H)^+$ |
| 1-1360; | A-38; | B-04; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 1-1361; | A-38; | B-05; | MS m/z | 424 | (M + H) + |
| 1-1362; | A-38; | B-06; | MS m/z | 464 | (M + H)+ |
| 1-1363; | A-38; | B-07; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 1-1364; | A-38; | B-08; | MS m/z | 450 | (M + H) ⁺ |
| 1-1365; | A-38; | B-09; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 1-1366; | A-38; | B-10; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 1-1367; | A-38; | B-11; | MS m/z | 478 | (M + H) + |
| 1-1368; | A-38; | B-12; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 1-1369; | A-38; | B-13 | | | |
| 1-1370; | A-38; | B-14; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 1-1371; | A-38; | B-15; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 1-1372; | A-38; | B-16; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 1-1373; | A-38; | B-17; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 1-1374; | A-38; | B-18; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 1-1375; | A-38; | B-19; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 1-1376; | A-38; | B-20; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 1-1377; | A-38; | B-21; | MS m/z | 454 | (M + H)+ |
|---------|-------------------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-1378; | A-38; | B-22; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 1-1379; | A-38; | B-23; | MS m/z | 470 | $(M + H)_+$ |
| 1-1380; | A-38; | B-24; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 1-1381; | A-38; | B-25 | | | |
| 1-1382; | A-38; | B-26; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-1383; | A-38; | B-27; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-1384; | A-38; | B-28; | MS m/z | 472 | (M + H)+ |
| 1-1385; | A-38; | B-29; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
| 1-1386; | A-38; | B-30; | MS m/z | 488 | (M + H)+ |
| 1-1387; | A-38; | B-31; | MS m/z | 490 | (M + H)+ |
| 1-1388; | A-38; | B-32; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-1389; | A-38; | B-33; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 1-1390; | A-38; | B-34; | MS m/z | 502 | (M + H)+ |
| 1-1391; | A-38; | B-35; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 1-1392; | A-38; | B-36; | MS m/z | 534 | (M + H)+ |
| 1-1393; | A-39; | B-01; | MS m/z | 460 | (M + H)+ |
| 1-1394; | A-39; | B-02; | MS m/z | 464 | (M + H)+ |
| 1-1395; | A-39; | B-03; | MS m/z | 422 | (M + H)+ |
| 1-1396; | A-39; | B-04; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 1-1397; | A-39; | B-05; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 1-1398; | A-39; | B-06; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 1-1399; | A-39; | B-07; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 1-1400; | A-39; | B-08; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 1-1401; | A-39; | B-09 | | | |
| 1-1402; | A-39; | B-10; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 1-1403; | A-39; | B-11; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 1-1404; | A-39; | B-12; | MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 1-1405; | A-39 _; | B-13; | MS m/z | 468 | $(M + H)^{+}$ |



| | | _ | | | |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-1406; | A-39; | B-14; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
| 1-1407; | A-39; | B-15; | MS m/z | 490 | (M + H)+ |
| 1-1408; | A-39; | B-16; | MS m/z | 496 | (M + H)+ |
| 1-1409; | A-39; | B-17; | MS m/z | 502 | (M + H)+ |
| 1-1410; | A-39; | B-18 | | | |
| 1-1411; | A-39; | B-19; | MS m/z | 516 | (M + H)+ |
| 1-1412; | A-39; | B-20; | MS m/z | 518 | (M + H)+ |
| 1-1413; | A-39; | B-21 | | | |
| 1-1414; | A-39; | B-22 | | | |
| 1-1415; | A-39; | B-23; | MS m/z | 538 | (M + H)+ |
| 1-1416; | A-39; | B-24; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 1-1417; | A-39; | B-25 | | | |
| 1-1418; | A-39; | B-26; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 1-1419; | A-39; | B-27; | MS m/z | 547 | (M + H)+ |
| 1-1420; | A-39; | B-28; | MS m/z | 540 | (M + H)+ |
| 1-1421; | A-39; | B-29; | MS m/z | 544 | (M + H)+ |
| 1-1422; | A-39; | B-30; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 1-1423; | A-39; | B-31; | MS m/z | 558 | (M + H)+ |
| 1-1424; | A-39; | B-32; | MS m/z | 560 | (M + H)+ |
| 1-1425; | A-39; | B-33 | | | |
| 1-1426; | A-39; | B-34 | | | |
| 1-1427; | A-39; | B-35; | MS m/z | 584 | $(M + H)^+$ |
| 1-1428; | A-39; | B-36; | MS m/z | 602 | $(M + H)^+$ |
| 1-1429; | A-41; | B-11; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1430; | A-41; | B-48; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1431; | A-41; | B-49; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1432; | A-41; | B-50; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-1433; | A-41; | B-51; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 1-1434; | A-41; | B-52; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| A-41; | B-53; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
|-------|---|---|---|--|
| A-41; | B-54; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| A-41; | B-55; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| A-41; | B-56; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| A-41; | B-57; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| A-41; | B-58; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-02; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| A-54; | B-37; | MS m/z | 415 | (M + H)+ |
| A-54; | B-38; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| A-54; | B-39; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-40; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-41; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-42; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| A-54; | B-43; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-44; | MS m/z | 443 | (M + H) |
| A-54; | B-45; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-46; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| A-54; | B-47; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-02; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-37; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-38; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-39; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-40; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| A-55; | B-41; | MS m/z | 403 | $(M + H)^{+}$ |
| A-55; | B-42; | MS m/z | 431 | (M · + H) + |
| A-55; | B-43; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| A-55; | B-44; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| A-55; | B-45; | MS m/z | 445 | $(M + H)_{+}$ |
| | | | | |
| | A-41; A-41; A-41; A-41; A-41; A-54; A-54; A-54; A-54; A-54; A-54; A-54; A-54; A-54; A-55; A-55; A-55; A-55; A-55; A-55; A-55; | A-41; B-54; A-41; B-55; A-41; B-56; A-41; B-57; A-41; B-58; A-54; B-02; A-54; B-38; A-54; B-39; A-54; B-40; A-54; B-41; A-54; B-42; A-54; B-43; A-54; B-45; A-54; B-46; A-54; B-46; A-54; B-46; A-55; B-37; A-55; B-38; A-55; B-39; A-55; B-39; A-55; B-40; A-55; B-41; A-55; B-42; A-55; B-42; A-55; B-43; A-55; B-44; | A-41; B-54; MS m/z A-41; B-55; MS m/z A-41; B-56; MS m/z A-41; B-57; MS m/z A-41; B-58; MS m/z A-41; B-58; MS m/z A-54; B-02; MS m/z A-54; B-37; MS m/z A-54; B-39; MS m/z A-54; B-40; MS m/z A-54; B-41; MS m/z A-54; B-42; MS m/z A-54; B-43; MS m/z A-54; B-45; MS m/z A-54; B-46; MS m/z A-54; B-46; MS m/z A-55; B-37; MS m/z A-55; B-38; MS m/z A-55; B-39; MS m/z A-55; B-40; MS m/z A-55; B-40; MS m/z A-55; B-41; MS m/z A-55; B-41; MS m/z A-55; B-42; MS m/z A-55; B-41; MS m/z A-55; B-42; MS m/z A-55; B-43; MS m/z A-55; B-44; MS m/z | A-41; B-54; MS m/z 449 A-41; B-55; MS m/z 449 A-41; B-56; MS m/z 461 A-41; B-57; MS m/z 467 A-41; B-58; MS m/z 445 A-54; B-02; MS m/z 415 A-54; B-38; MS m/z 429 A-54; B-40; MS m/z 431 A-54; B-41; MS m/z 431 A-54; B-42; MS m/z 431 A-54; B-43; MS m/z 431 A-54; B-44; MS m/z 431 A-54; B-45; MS m/z 443 A-54; B-46; MS m/z 443 A-54; B-46; MS m/z 443 A-54; B-47; MS m/z 445 A-55; B-02; MS m/z 445 |

| 1-1464; | A-55; | B-47; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 1-1465; | A-56; | B-02; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-1466; | A-56; | B-37; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-1467; | A-56; | B-38; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-1468; | A-56; | B-39; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-1469; | A-56; | B-40; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-1470; | A-56; | B-41; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 1-1471; | A-56; | B-42; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-1472; | A-56; | B-43; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-1473; | A-56; | B-44; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-1474; | A-56; | B-45; | MS m/z | 445 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1475; | A-56; | B-46; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-1476; | A-56; | B-47; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-1477; | A-57; | B-02; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 1-1478; | A-57; | B-37; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 1-1479; | A-57; | B-38; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-1480; | A-57; | B-39; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-1481; | A-57; | B-40; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-1482; | A-57; | B-41; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-1483; | A-57; | B-42; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 1-1484; | A-57; | B-43; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 1-1485; | A-57; | B-44; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1486; | A-57; | B-45; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-1487; | A-57; | B-46; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1488; | A-57; | B-47; | MS m/z | 459 | (M + H) + |
| 1-1489; | A-58; | B-02; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 1-1490; | A-58; | B-37; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 1-1491; | A-58; | B-38; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-1492; | A-58; | B-39; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |

| 1-1493; | A-58; | B-40; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 1-1494; | A-58; | B-41; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 1-1495; | A-58; | B-42; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 1-1496; | A-58; | B-43; | MS m/z | 417 | (M + H)+. |
| 1-1497; | A-58; | B-44; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-1498; | A-58; | B-45; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 1-1499; | A-58; | B-46; | MS m/z | 429 | (M + H)+ |
| 1-1500; | A-58; | B-47; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 1-1501; | A-59; | B-02; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 1-1502; | A-59; | B-37; | MS m/z | 433 | (M + H) + |
| 1-1503; | A-59; | B-38; | MS m/z | 447 | (M + H) + |
| 1-1504; | A-59; | B-39; | MS m/z | 447 | (M + H) + |
| 1-1505; | A-59; | B-40; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-1506; | A-59; | B-41; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-1507; | A-59; | B-42; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-1508; | A-59; | B-43; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-1509; | A-59; | B-44; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1510; | A-59; | B-45; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1511; | A-59; | B-46; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1512; | A-59; | B-47; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 1-1513; | A-60; | B-02; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
| 1-1514; | A-60; | B-37; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 1-1515; | A-60; | B-38; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-1516; | A-60; | B-39; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-1517; | A-60; | B-40; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-1518; | A-60; | B-41; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-1519; | A-60; | B-42; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-1520; | A-60; | B-43; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 1-1521; | A-60; | B-44; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |

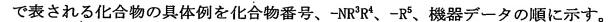
| 1-1522; | A-60; | B-45; | MS m/z | 451 | $(M + H)^{+}$ |
|---------|-------|--------|--------|-----|----------------------|
| 1-1523; | A-60; | B-46; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 1-1524; | A-60; | B-47; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 1-1525; | A-61; | B-11; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-1526; | A-61; | B-48; | MS m/z | 477 | (M + H) ⁺ |
| 1-1527; | A-61; | B-49; | MS m/z | 475 | (M + H)+ |
| 1-1528; | A-61; | B-50; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-1529; | A-61; | B-51; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-1530; | A-61; | B-52; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1531; | A-61; | ·B-53; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1532; | A-61; | B-54; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1533; | A-61; | B-55; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1534; | A-61; | B-56; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-1535; | A-61: | B-57; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-1536; | A-61; | B-58; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1537; | A-62; | B-11; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1538; | A-62; | B-48; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1539; | A-62; | B-49; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1540; | A-62; | B-50; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1541; | A-62; | B-51; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1542; | A-62; | B-52; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1543; | A-62; | B-53; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1544; | A-62; | B-54; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1545; | A-62; | B-55; | MS m/z | 461 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1546; | A-62; | B-56; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-1547; | A-62; | B-57; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-1548; | A-62; | B-58; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1549; | A-63; | B-11; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1550; | A-63; | B-48; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 1-1551; | A-63; | B-49; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1552; | A-63; | B-50; | MS m/z | 461 | (M + H) ⁺ |
| 1-1553; | A-63; | B-51; | MS m/z | 477 | $(M + \cdot H)^+$ |
| 1-1554; | A-63; | B-52; | MS m/z | 475 | (M + H)+ |
| 1-1555; | A-63; | B-53; | MS m/z | 463 | (M + H) ⁺ |
| 1-1556; | A-63; | B-54; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1557; | A-63; | B-55; | MS m/z | 461 | (M + H) ⁺ |
| 1-1558; | A-63; | B-56; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-1559; | A-63; | B-57; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 1-1560; | A-63; | B-58; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1561; | A-64; | B-11; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1562; | A-64; | B-48; | MS m/z | 477 | (M + H) ⁺ |
| 1-1563; | A-64; | B-49; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 1-1564; | A-64; | B-50; | MS m/z | 461 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1565; | A-64; | B-51; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 1-1566; | A-64; | B-52; | MS m/z | 475 | (M + H)+ |
| 1-1567; | A-64; | B-53; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1568; | A-64; | B-54; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 1-1569; | A-64; | B-55; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1570; | A-64; | B-56; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 1-1571; | A-64; | B-57; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 1-1572; | A-64; | B-58; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1573; | A-65; | B-11; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1574; | A-65; | B-48; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1575; | A-65; | B-49; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1576; | A-65; | B-50; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 1-1577; | A-65; | B-51; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1578; | A-65; | B-52; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1579; | A-65; | B-53; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |



| 1-1580; | A-65; | B-54; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|---------|--------------|---------------|
| 1-1581; | A-65; | B-55; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-1582; | A-65; | B-56; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-1583; | A-65; | B-57; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1584; | A-65; | B-58; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 1-1585; | A-66; | B-11; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 1-1586; | A-66; | B-48; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1587; | A-66; | B-49; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1588; | A-66; | B-50; | .MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 1-1589; | A-66; | B-51; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 1-1590; | A-66; | B-52; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 1-1591; | A-66; | B-53; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 1-1592; | A-66; | B-54; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 1-1593; | A-66; | B-55; | MS m/z | 447 | $(M + H)_+$ |
| 1-1594; | A-66; | B-56; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-1595; | A-66; | B-57; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1596; | A-66; | B-58; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 1-1597; | A-72; | B-01; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 1-1598; | A-72; | B-02; | MS m/z | 383 | $(M + H)^+$ |
| 1-1599; | A-72; | B-03; | MS m/z | 341 | $(M + H)^+$ |
| 1-1600; | A-72; | B-04; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 1-1601; | A-72; | B-05; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 1-1602; | A-72; | B-06; | MS m/z | 451 . | $(M + H)^+$ |
| 1-1603; | A-72; | B-07; | MS m/z | 431 | $(M + H)^{+}$ |
| 1-1604; | A-72; | B-08; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 1-1605; | A-72; | B-09; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 1-1606; | A-72; | B-10; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 1-1607; | A-72; | B-11; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 1-1608; | A-72; | B-12; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| | | _ | | | |
|----------|--------------|-------|--------|-----|----------------------|
| 1-1609; | A-72; | B-13; | MS m/z | 387 | (M + H) ⁺ |
| 1-1610; | A-72; | B-14; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 1-1611; | A-72; | B-15; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 1-1612; | A-72; | B-16; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 1-1613; | A-72; | B-17; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 1-1614; | A-72; | B-18; | MS m/z | 425 | (M + H) ⁺ |
| 1-1615; | A-72; | B-19; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 1-1616; | A-72; | B-20; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 1-1617; | A-72; | B-21; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 1-1618; | A-72; | B-22; | MS m/z | 445 | (M + H) + |
| 1-1619; | A-72; | B-23; | MS m/z | 457 | (M + H) + |
| 1-1620; | A-72; | B-24; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 1-1621; | A-72; | B-25; | MS m/z | 426 | (M + H)+ |
| 1-1622; | A-72; | B-26; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 1-1623; | A-72; | B-27; | MS m/z | 466 | (M + H) + |
| 1-1624; | A-72; | B-28; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 1-1625; | A-72; | B-29; | MS m/z | 463 | (M + H) + |
| 1-1626; | A-72; | B-30; | MS m/z | 475 | (M + H) + |
| 1-1627; | A-72; | B-31; | MS m/z | 477 | (M + H) + |
| 1-1628; | A-72; | B-32; | MS m/z | 479 | (M + H) + |
| 1-1629; | A-72; | B-33; | MS m/z | 479 | (M + H) + |
| 1-1630; | A-72; | B-34; | MS m/z | 489 | (M + H) ⁺ |
| 1-1631; | A-72; | B-35; | MS m/z | 503 | (M + H)+ |
| 1-1632; | A-72; | B-36; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| (1) //./ | \ :blm (T \ | ~ × · | | | |



- 2-1; A-07; B-32; MS m/z 479 (M + H)⁺
- 2-2; A-09; B-13; MS m/z 413 (M + H)⁺
- 2-3; A-09; B-14; MS m/z 421 $(M + H)^+$
- 2-4; A-09; B-15; MS m/z 435 (M + H)⁺
- 2-5; A-09; B-16; MS m/z 441 (M + H)⁺
- 2-6; A-09; B-17; MS m/z 447 $(M + H)^+$
- 2-7; A-09; B-18; MS m/z 451 (M + H)⁺
- 2-8; A-09; B-19; MS m/z 461 (M + H)+
- 2-9; A-09; B-20; MS m/z 463 $(M + H)^+$
- 2-10; A-09; B-21; MS m/z 467 (M + H)⁺
- 2-11; A-09; B-22; MS m/z 471 (M + H)*
- 2-12; A-09; B-23; MS m/z 483 (M + H)⁺
- 2-13; A-09; B-24; MS m/z 483 (M + H)⁺
- 2-14; A-09; B-32; MS m/z 505 (M + H)⁺
- 2-15; A-10; B-13; MS m/z 413 (M + H)*
- 2-16; A-10; B-14; MS m/z 421 (M + H)⁺
- 2-17; A-10; B-15; MS m/z 435 (M + H)⁺
- 2-18; A-10; B-16; MS m/z 441 (M + H)⁺
- 2-19; A-10; B-17; MS m/z 447 (M + H)⁺
- 2-20; A-10; B-18; MS m/z 451 (M + H)⁺
- 2-21; A-10; B-19; MS m/z 461 (M + H)⁺
- 2-22; A-10; B-20; MS m/z 463 (M + H)⁺
- 2-23; A-10; B-21; MS m/z 467 (M + H)⁺
- 2-24; A-10; B-22; MS m/z 471 (M + H)⁺
- 2-25; A-10; B-23; MS m/z 483 (M + H)⁺
- 2-26; A-10; B-24; MS m/z 483 (M + H)⁺
- 2-27; A-11; B-13; MS m/z 413 (M + H)⁺
- 2-28; A-11; B-14; MS m/z 421 (M + H)⁺

| 2-29; | A-11; | B-15; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 2-30; | A-11; | B−16; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 2-31; | A-11; | B-17; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 2-32; | A-11; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 2-33; | A-11; | B-19; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 2-34; | A-11; | B-20; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 2-35; | A-11; | B-21; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 2-36; | A-11; | B-22; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 2-37; | A-11; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 2-38; | A-11; | B-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 2-39; | A-11; | B-31; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 2-40; | A-12; | B-13; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 2-41; | A-12; | B-14; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 2-42; | A-12; | B-15; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 2-43; | A-12; | B-16; | MS m/z | 441 | $(M + H)^+$ |
| 2-44; | A-12; | B-17; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 2-45; | A-12; | B-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 2-46; | A-12; | B-19; | MS m/z | 461 | (M + H) |
| 2-47; | A-12; | B-20; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 2-48; | A-12; | B-21; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 2-49; | A-12; | B-22; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 2-50; | A-12; | B-23; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 2-51; | A-12; | B-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 2-52; | A-13; | B-13; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 2-53; | A-13; | B-14; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 2-54; | A-13; | B-15; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 2-55; | A-13; | B-16; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 2-56; | A-13; | B-17; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 2-57; | A-13; | B-18; | MS m/z | 459 | (M + H)+ |
| | | | | | |



| 2-58; | A-13; | B-19; | MS m/z | 469 | (M + H)+ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 2-59; | A-13; | B-20; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 2-60; | A-13; | B-21; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 2-61; | A-13; | B-22; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 2-62; | A-13; | B-23; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 2-63; | A-13; | B-24; | MS m/z | 491 | (M + H) + |
| 2-64; | A-14; | B-13; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 2-65; | A-14; | B-14; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 2-66; | A-14; | B-15; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 2-67; | A-14; | B-16; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 2-68; | A-14; | B-17; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 2-69; | A-14; | B-18; | MS m/z | 459 | (M + H)+ |
| 2-70; | A-14; | B-19; | MS m/z | 469 | (M + H)+ |
| 2-71; | A-14; | B-20; | MS m/z | 471 | (M + H) + |
| 2-72; | A-14; | B-21; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 2-73; | A-14; | B-22; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 2-74; | A-14; | B-23; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 2-75; | A-14; | B-24; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 2-76; | A-15; | B-13; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 2-77; | A-15; | B-14; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 2-78; | A-15; | B-15; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 2-79; | A-15; | B-16; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 2-80; | A-15; | B-17; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 2-81; | A-15; | B-18; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 2-82; | A-15; | B-19; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 2-83; | A-15; | B-20; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 2-84; | A-15; | B-21; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 2-85; | A-15; | B-22; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 2-86; | A-15; | B-23; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |

| 2-87; | A-15; | B-24; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
|--------|--------|-------|--------|-----|----------------------|
| 2-88; | A-16; | B-13; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 2-89; | A-16; | B-14; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 2-90; | A-16; | B-15; | MS m/z | 457 | (M + H) ⁺ |
| 2-91; | A-16; | B-16; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 2-92; | A-16; | B-17; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 2-93; | A-16; | B-18; | MS m/z | 473 | (M + H) + |
| 2-94; | A-16; | B-19; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 2-95; | A-16; | B-20; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 2-96; | A-16; | B-21; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 2-97; | A-16; | B-22; | MS m/z | 493 | $(M + H)^{+}$ |
| 2-98; | A-16; | B-23; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 2-99; | A-16; | B-24; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 2-100; | A-17 ; | B-19; | MS m/z | 489 | (M + H) ⁺ |
| 2-101; | A-18; | B-08; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 2-102; | A-19; | B-05; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 2-103; | A-19; | B-16; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 2-104; | A-19 ; | B-31; | MS m/z | 523 | (M + H) ⁺ |
| 2-105; | A-24; | B-09; | MS m/z | 527 | (M + H)+ |
| 2-106; | A-24; | B-19; | MS m/z | 523 | (M + H) ⁺ |
| 2-107; | A-24; | B-32; | MS m/z | 567 | (M + H) ⁺ |
| (c) { | 公合物(I |)のうち | • | | |

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR³R⁴、-R⁶、機器データの順に示す。 3-1; A-09; B-01

| 3-2 | : | A-09; | B-02 |
|-----|---|-------|------|
| | , | , | |

$$3-4$$
; A-09; B-04; MS m/z 377 (M + H)⁺

$$3-7$$
; A-09; B-07; MS m/z 409 (M + H)⁺

$$3-13$$
; A-09; B-13; MS m/z 365 (M + H)⁺

$$3-14$$
; A-09; B-14; MS m/z 373 (M + H)⁺

$$3-15$$
; A-09; B-15; MS m/z 387 (M + H)⁺

$$3-16$$
; A-09; B-16; MS m/z 393 (M + H)⁺

$$3-17$$
; A-09; B-17; MS m/z 399 (M + H)⁺

$$3-18$$
; A-09; B-18; MS m/z 403 (M + H)⁺

$$3-19$$
; A-09; B-19; MS m/z 413 (M + H)⁺

$$3-20$$
; $A-09$; $B-20$; $MS m/z$ 415 $(M + H)^+$

$$3-21$$
; A-09; B-21; MS m/z, 419 (M + H)⁺

$$3-22$$
; A-09; B-22; MS m/z 423 (M + H)⁺

$$3-23$$
; A-09; B-23; MS m/z 435 (M + H)⁺

$$3-24$$
; A-09; B-24; MS m/z 435 (M + H)⁺

$$3-25$$
; A-10; B-01; MS m/z 357 (M + H)⁺

$$3-26$$
; A-10; B-02; MS m/z 361 (M + H)⁺

$$3-27$$
; A-10; B-03; MS m/z 319 (M + H)⁺

$$3-28$$
; A-10; B-04; MS m/z 377 (M + H)⁺

$$3-29$$
; A-10; B-05; MS m/z 389 (M + H)⁺

$$3-30$$
; A-10; B-06; MS m/z 429 (M + H)⁺



| 3-31; | A-10; | B-07; | MS m/z | 409 | (M + H) + |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 3-32; | A-10; | B-08; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-33; | A-10; | B-09; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 3-34; | A-10; | B-10; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 3-35; | A-10; | B-11; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 3-36; | A-10; | B-12; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 3-37; | A-10; | B-13; | MS m/z | 365 | $(M + H)^+$ |
| 3-38; | A-10; | B-14; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 3-39; | A-10; | B-15; | MS m/z | 387 | $(M + H)^+$ |
| 3-40; | A-10; | B-16; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 3-41; | A-10; | B-17; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 3-42; | A-10; | B-18; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 3-43; | A-10; | B-19; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 3-44; | A-10; | B-20; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-45; | A-10; | B-21; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 3-46; | A-10; | B-22; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 3-47; | A-10; | B-23; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-48; | A-10; | B-24; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-49; | A-11; | B-01; | MS m/z | 357 | $(M + H)^+$ |
| 3-50; | A-11; | B-02; | MS m/z | 361 | $(M + H)^+$ |
| 3-51; | A-11; | B-03; | MS m/z | 319 | $(M + H)^+$ |
| 3-52; | A-11; | B-04; | MS m/z | 377 | $(M + H)^+$ |
| 3-53; | A-11; | B-05; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 3-54; | A-11; | B-06; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 3-55; | A-11; | B-07; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 3-56; | A-11; | B-08; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-57; | A-11; | B-09; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| 3-58; | A-11; | B-10; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 3-59; | A-11; | B-11; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |



| | | _ | | | |
|-------|----------|-------|--------|-----|---------------|
| 3-60; | · A-11 ; | B-12; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 3-61; | A-11; | B-13; | MS m/z | 365 | (M + H)+ |
| 3-62; | A-11; | B-14; | MS m/z | 373 | (M + H)+ |
| 3-63; | A-11 ; | B-15; | MS m/z | 387 | (M + H)+ |
| 3-64; | A-11; | B-16; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 3-65; | A-11; | B-17; | MS m/z | 399 | $(M + H)^{+}$ |
| 3-66; | A-11 ; | B-18; | MS m/z | 403 | (M + H)+ |
| 3-67; | A-11; | B-19; | MS m/z | 413 | (M + H)+ |
| 3-68; | A-11 ; | B-20; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-69; | A-11; | B-21; | MS m/z | 419 | (M ·+ H) + |
| 3-70; | A-11 ; | B-22; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 3-71; | A-11 ; | B-23; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-72; | A-11; | B-24; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-73; | A-12; | B-01; | MS m/z | 357 | (M + H)+ |
| 3-74; | A-12; | B-02; | MS m/z | 361 | (M + H)+ |
| 3-75; | A-12; | B-03; | MS m/z | 319 | $(M + H)^+$ |
| 3-76; | A-12; | B-04; | MS m/z | 377 | $(M + H)^+$ |
| 3-77; | A-12; | B-05; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 3-78; | A-12; | B-06; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 3-79; | A-12; | B-07; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 3-80; | A-12; | B-08; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-81; | A-12; | B-09; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 3-82; | A-12; | B-10; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 3-83; | A-12; | B-11; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 3-84; | A-12; | B-12; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 3-85; | A-12; | B-13; | MS m/z | 365 | (M + H)+ |
| 3-86; | A-12; | B-14; | MS m/z | 373 | (M + H) + |
| 3-87; | A-12; | B-15; | MS m/z | 387 | $(M + H)^+$ |
| 3-88; | A-12; | B-16; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| | • | | | | |



| 3-89; | A-12; | B-17; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-------|----------------------|
| 3-90; | A-12; | B-18; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 3-91; | A-12; | B-19; | MS m/z | 413 | (M + H) + |
| 3-92; | A-12; | B-20; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-93; | A-12; | B-21; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 3-94; | A-12; | B-22; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
| 3-95; | A-12; | B-23; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-96; | A-12; | B-24; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-97; | A-13; | B-01; | MS m/z | 365 | $(M + H)^+$ |
| 3-98; | A-13; | B-02; | MS m/z | · 369 | (M + H) + |
| 3-99; | A-13; | B-03; | MS m/z | 327 | $(M + H)^+$ |
| 3-100; | A-13; | B-04; | MS m/z | 385 | (M + H)+ |
| 3-101; | A-13; | B-05; | MS m/z | 397 | (M + H) + |
| 3-102; | A-13; | B-06; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 3-103; | A-13; | B-07; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 3-104; | A-13; | B-08; | MS m/z | 423 | (M + H)+ |
| 3-105; | A-13; | B-09; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 3-106; | A-13; | B-10; | MS m/z | 447 | (M + H) + |
| 3-107; | A-13; | B-11; | MS m/z | 451 | (M + H) + |
| 3-108; | A-13; | B-12; | MS m/z | 459 | (M + H) ⁺ |
| 3-109; | A-13; | B-13; | MS m/z | 373 | (M + H) + |
| 3-110; | A-13; | B-14; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
| 3-111; | A-13; | B-15; | MS m/z | 395 | (M + H) + |
| 3-112; | A-13; | B-16; | MS m/z | 401 | (M + H) + |
| 3-113; | A-13; | B-17; | MS m/z | 407 | (M + H)+ |
| 3-114; | A-13; | B-18; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 3-115; | A-13; | B-19; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 3-116; | A-13; | B-20; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 3-117; | A-13; | B-21; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |



| 3-118; | A-13; | B-22; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-------------|----------------------|
| 3-119; | A-13; | B-23; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 3-120; | A-13; | B-24; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 3-121; | A-14; | B-01; | MS m/z | 365 | (M + H)+ |
| 3-122; | A-14; | B-02; | MS m/z | 369 | $(M + H)^+$ |
| 3-123; | A-14; | B-03; | MS m/z | 327 | $(M + H)^{+}$ |
| 3-124; | A-14; | B-04; | MS m/z | 385 | (M + H)+ |
| 3-125; | A-14; | B-05; | MS m/z | 397 | $(M + H)^+$ |
| 3-126; | A-14; | B-06; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 3-127; | A-14; | B-07; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 3-128; | A-14; | B-08; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 3-129; | A-14; | B-09; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 3-130; | A-14; | B-10; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 3-131; | A-14; | B-11; | MS m/z | 4 51 | (M + H)+ |
| 3-132; | A-14; | B-12; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 3-133; | A-14; | B-13; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 3-134; | A-14; | B-14; | MS m/z | 381 | (M + H) ⁺ |
| 3-135; | A-14; | B-15; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 3-136; | A-14; | B-16; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 3-137; | A-14; | B-17; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 3-138; | A-14; | B-18; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 3-139; | A-14; | B-19; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 3-140; | A-14; | B-20; | MS m/z | 423 | $(M + H)^{+}$ |
| 3-141; | A-14; | B-21; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 3-142; | A-14; | B-22; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 3-143; | A-14; | B-23; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 3-144; | A-14; | B-24; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 3-145; | A-15; | B-01; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 3-146; | A-15; | B-02; | MS m/z | 377 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |



| 3-147; | A−15 ; | B-03; | MS m/z | 335 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|--------|-----|-------------|
| 3-148; | A-15 ; | B-04; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 3-149; | A-15; | B-05; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 3-150; | A-15 ; | B-06 | | | |
| 3-151; | A-15; | B-07; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 3-152; | A-15; | B-08; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 3-153; | A-15 ; | B-09; | MS m/z | 433 | (M + H)+ |
| 3-154; | A-15; | B-10; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 3-155; | A-15; | B-11; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 3-156; | A-15; | B-12; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 3-157; | A-15; | B-13; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
| 3-158; | A-15; | B-14; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 3-159; | A-15; | B-15; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 3-160; | A-15; | B-16; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 3-161; | A-15; | B-17; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 3-162; | A-15; | B-18; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 3-163; | A-15; | B-19; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 3-164; | A-15; | B-20; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 3-165; | A-15; | B-21; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 3-166; | A-15; | B-22; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 3-167; | A-15; | B-23; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 3-168; | A-15; | B-24; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 3-169; | A-16; | B-01; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 3-170; | A-16; | B-02; | MS m/z | 383 | $(M + H)^+$ |
| 3-171; | A-16; | B-03; | MS m/z | 341 | $(M + H)^+$ |
| 3-172; | A-16; | B-04; | MS m/z | 399 | $(M + H)^+$ |
| 3-173; | A-16; | B-05; | MS m/z | 411 | (M + H) + |
| 3-174; | A-16; | B-06; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 3-175; | A-16; | B-07; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |



$$3-177$$
; A-16; B-09; MS m/z 439 (M + H)⁺

$$3-178$$
; A-16; B-10; MS m/z 461 (M + H)⁺

$$3-179$$
; A-16; B-11; MS m/z 465 (M + H)⁺

$$3-180$$
; $A-16$; $B-12$; $MS m/z$ 473 $(M + H)^+$

$$3-181$$
; $A-16$; $B-13$; $MS m/z 387 (M + H)^+$

$$3-182$$
; A-16; B-14; MS m/z 395 (M + H)⁺

$$3-183$$
; $A-16$; $B-15$; $MS m/z$ 409 $(M + H)^+$

$$3-184$$
; $A-16$; $B-16$; $MS m/z$ 415 $(M + H)^+$

$$3-185$$
; $A-16$; $B-17$; $MS m/z$ 421 $(M + H)^+$

$$3-186$$
; A-16; B-18; MS m/z 425 (M + H)⁺

$$3-187$$
; A-16; B-19; MS m/z 435 (M + H)⁺

$$3-188$$
; $A-16$; $B-20$; $MS m/z$ 437 $(M + H)^+$

$$3-189$$
; $A-16$; $B-21$; $MS m/z$ 441 $(M + H)^+$

$$3-190$$
; $A-16$; $B-22$; $MS m/z$ 445 $(M + H)^+$

$$3-191$$
; A-16; B-23; MS m/z 457 (M + H)⁺

$$3-192$$
; A-16; B-24; MS m/z 457 (M + H)⁺

$$3-193$$
; $A-19$; $B-08$; $MS m/z$ 435 $(M + H)^+$

$$3-194$$
; A-19; B-19; MS m/z 433 (M + H)⁺

(d) 化合物 (I) のうち、

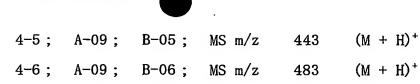
で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR³R⁴、-R⁵、機器データの順に示す。

4-1; A-09; B-01; MS m/z 411 (M + H)⁺

4-2; A-09; B-02; MS m/z 415 (M + H)⁺

4-3; A-09; B-03; $MS m/z 373 (M + H)^+$

4-4; A-09; B-04; MS m/z 431 (M + H)⁺



$$4-7$$
; A-09; B-07; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$4-8$$
; $A-09$; $B-08$; $MS m/z$ 469 $(M + H)^+$

$$4-9$$
; $A-09$; $B-09$; $MS m/z$ 471 $(M + H)^+$

$$4-10$$
; $A-09$; $B-10$; $MS m/z$ 493 $(M + H)^+$

$$4-11$$
; $A-09$; $B-11$; $MS m/z$ 497 $(M + H)$

$$4-12$$
; $A-09$; $B-12$; $MS m/z$ 505 . $(M + H)^+$

$$4-13$$
; A-10; B-01; MS m/z 411 (M + H)⁺

$$4-14$$
; A-10; B-02; MS m/z 415 (M + H)⁺

$$4-15$$
; A-10; B-03; MS m/z 373 (M + H)⁺

$$4-16$$
; A-10; B-04; MS m/z 431 (M + H)*

$$4-17$$
; A-10; B-05; MS m/z 443 (M + H)⁺

$$4-18$$
; $A-10$; $B-06$; $MS m/z$ 483 $(M + H)^+$

$$4-19$$
; A-10; B-07; MS m/z 463 (M + H)⁺

$$4-20$$
; A-10; B-08; MS m/z 469 (M + H)⁺

$$4-21$$
; A-10; B-09; MS m/z 471 (M + H)⁺

$$4-22$$
; A-10; B-10; MS m/z 493 (M + H)*

$$4-23$$
; A-10; B-11; MS m/z 497 (M + H)⁺

$$4-24$$
; A-10; B-12; MS m/z 505 (M + H)⁺

$$4-25$$
; A-11; B-01; MS m/z 411 (M + H)⁺

$$4-26$$
; A-11; B-02; MS m/z 415 (M + H)⁺

$$4-27$$
; A-11; B-03; MS m/z 373 (M + H)⁺

$$4-28$$
; A-11; B-04; MS m/z 431 (M + H)⁺

$$4-29$$
; A-11; B-05; MS m/z 443 (M + H)⁺

$$4-29$$
; A-11; B-05; MS m/z 443 (M + H)

$$4-30$$
; $A-11$; $B-06$; $MS m/z$ 483 $(M + H)^+$

$$4-31$$
; $A-11$; $B-07$; $MS m/z$ 463 $(M + H)^+$

$$4-32$$
; A-11; B-08; MS m/z 469 (M + H)⁺

$$4-33$$
; A-11; B-09; MS m/z 471 (M + H)⁺

| | | _ | | | |
|-------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 4-34; | A-11; | B-10; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 4-35; | A-11; | B-11; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 4-36; | A-11; | B-12; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 4-37; | A-12; | B-01; | MS m/z | 411 | (M + H)* |
| 4-38; | A-12; | B-02; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 4-39; | A-12; | B-03; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 4-40; | A-12; | B-04; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 4-41; | A-12; | B-05; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 4-42; | A-12; | B-06; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 4-43; | A-12; | B-07; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 4-44; | A-12; | B-08; | MS m/z | 469 | (M + H)+ |
| 4-45; | A-12; | B-09; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 4-46; | A-12; | B-10; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 4-47; | A-12; | B-11; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 4-48; | A-12; | B-12; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 4-49; | A-13; | B-01; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 4-50; | A-13; | B-02; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 4-51; | A-13; | B-03; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
| 4-52; | A-13; | B-04; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 4-53; | A-13; | B-05; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 4-54; | A-13; | B-06; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 4-55; | A-13; | B-07; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 4-56; | A-13; | B-08; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 4-57; | A-13; | B-09; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 4-58; | A-13; | B-10; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 4-59; | A-13; | B-11; | MS m/z | 505 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-60; | A-13; | B-12; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 4-61; | A-14; | B-01; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 4-62; | A-14; | B-02; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |

| 4-63; | A-14; | B-03; | MS m/z | 381 | $(M + H)^+$ |
|-------|--------|-------|--------|------|---------------|
| 4-64; | A-14; | B-04; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 4-65; | A-14; | B-05; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 4-66; | A-14; | B-06; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 4-67; | A-14; | B-07; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 4-68; | A-14; | B-08; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 4-69; | A-14; | B-09; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 4-70; | A-14; | B-10; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 4-71; | A-14; | B-11; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 4-72; | ~A−14; | B-12; | MS m/z | 513 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-73; | A-15; | B-01; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 4-74; | A-15; | B-02; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 4-75; | A-15; | B-03; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 4-76; | A-15; | B-04; | MS m/z | 447 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-77; | A-15; | B-05; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 4-78; | A-15; | B-06; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 4-79; | A-15; | B-07; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 4-80; | A-15; | B-08; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 4-81; | A-15; | B-09; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 4-82; | A-15; | B-10; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 4-83; | A-15; | B-11; | MS m/z | 513 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-84; | A-15; | B-12; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 4-85; | A-16; | B-01; | MS m/z | 433 | $(M + H)_{+}$ |
| 4-86; | A-16; | B-02; | MS m/z | 437 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-87; | A-16; | B-03; | MS m/z | 395 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-88; | A-16; | B-04; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 4-89; | A-16; | B-05; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 4-90; | A-16; | B-06; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 4-91; | A-16; | B-07; | MS m/z | .485 | $(M + H)^+$ |

4-120;

A-26;

B-12;

MS m/z

| | | | | | ` |
|--------|--------|-------|---------|-----|----------------------|
| 4-92; | A-16; | B-08; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 4-93; | A-16; | B-09; | MS m/z | 493 | (M + H)+ |
| 4-94; | A-16; | B-10; | MS m/z | 515 | (M + H)+ |
| 4-95; | A-16; | B-11; | MS m/z | 519 | (M + H) + |
| 4-96; | A-16; | B-12; | MS m/z | 527 | (M + H) + |
| 4-97; | A-25; | B-01; | MS m/z | 400 | (M + H)+ |
| 4-98; | A-25; | B-02; | MS m/z | 404 | (M + H)+ |
| 4-99; | A-25; | B-03; | MS m/z | 362 | (M + H)+ |
| 4-100; | A-25; | B-04; | MS m/z | 420 | (M + H)+ |
| 4-101; | A-25; | B-05; | MS m/z | 432 | (M + H)+ |
| 4-102; | A-25; | B-06; | MS m/z | 472 | (M + H) + |
| 4-103; | A-25; | B-07; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 4-104; | A-25; | B-08; | MS m/z | 458 | (M + H)+ |
| 4-105; | A-25; | B-09; | MS m/z | 460 | (M + H)+ |
| 4-106; | A-25; | B-10; | MS m/z | 482 | (M + H) + |
| 4-107; | A-25; | B-11; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 4-108; | A-25; | B-12; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 4-109; | A-26; | B-01; | MS m/z | 406 | (M + H)+ |
| 4-110; | A-26; | B-02; | MS m/z | 410 | (M + H)+ |
| 4-111; | A-26; | B-03; | MS m/z | 368 | $(M + H)^+$ |
| 4-112; | A-26; | B-04; | MS m/z | 426 | $(M + H)^+$ |
| 4-113; | A-26; | B-05; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 4-114; | -A-26; | B-06; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 4-115; | A-26; | B-07; | MS' m/z | 458 | (M + H) ⁺ |
| 4-116; | A-26; | B-08; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 4-117; | A-26; | B-09; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 4-118; | A-26; | B-10; | MS m/z | 488 | (M + H)+ |
| 4-119; | A-26; | B-11; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

500

 $(M + H)^+$



| 4-121; | A-27; | B-01; | MS m/z | 440 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-------|----------------------|
| 4-122; | A-27; | B-02; | MS m/z | 444 | (M + H)+ |
| 4-123; | A-27; | B-03; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 4-124; | A-27; | B-04; | MS m/z | 460 | (M + H) ⁺ |
| 4-125; | A-27; | B-05; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 4-126; | A-27; | B-06; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 4-127; | A-27; | B-07; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 4-128; | A-27; | B-08; | MS m/z | . 498 | $(M + H)^+$ |
| 4-129; | A-27; | B-09; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 4-130; | A-27; | B-10; | MS m/z | · 522 | $(M + H)^+$ |
| 4-131; | A-27; | B-11; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 4-132; | A-27; | B-12; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 4-133; | A-28; | B-01; | MS m/z | 470 | (M + H) |
| 4-134; | A-28; | B-02; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 4-135; | A-28; | B-03; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 4-136; | A-28; | B-04; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 4-137; | A-28; | B-05; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 4-138; | A-28; | B-06; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 4-139; | A-28; | B-07; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 4-140; | A-28; | B-08; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 4-141; | A-28; | B-09; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| 4-142; | A-28; | B-10; | MS m/z | 552 | $(M + H)^+$ |
| 4-143; | A-28; | B-11; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 4-144; | A-28; | B-12; | MS m/z | 564 | $(M + H)^+$ |
| 4-145; | A-29; | B-01; | MS m/z | 385 | $(M + H)^+$ |
| 4-146; | A-29; | B-02; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 4-147; | A-29; | B-03; | MS m/z | 347 | $(M + H)^+$ |
| 4-148; | A-29; | B-04; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 4-149; | A-29; | B-05; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |

| 4-150; | A-29; | B-06; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 4-151; | A-29; | B-07; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 4-152; | A-29; | B-08; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 4-153; | A-29; | B-09; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 4-154; | A-29; | B-10; | MS m/z | 467 | (M + H) + |
| 4-155; | A-29; | B-11; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 4-156; | A-29; | B-12; | MS m/z | 479 | (M + H) + |
| 4-157; | A-30; | B-01; | MS m/z | 428 | $(M + H)^{+}$ |
| 4-158; | A-30; | B-02; | MS m/z | 432 | (M + H) ⁺ |
| 4-159; | A-30; | B-03; | MS m/z | 390 | (M·+ H)+ |
| 4-160; | A-30; | B-04; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 4-161; | A-30; | B-05; | MS m/z | 460 | (M + H) + |
| 4-162; | A-30; | B-06; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
| 4-163; | A-30; | B-07; | MS m/z | 480 | (M + H) ⁺ |
| 4-164; | A-30; | B-08; | MS m/z | 486 | (M + H)+ |
| 4-165; | A-30; | B-09; | MS m/z | 488 | (M + H) + |
| 4-166; | A-30; | B-10; | MS m/z | 510 | (M + H) + |
| 4-167; | A-30; | B-11; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 4-168; | A-30; | B-12; | MS m/z | 522 | (M + H) + |
| 4-169; | A-31; | B-01; | MS m/z | 428 | $(M + H)_{+}$ |
| 4-170; | A-31; | B-02; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 4-171; | A-31; | B-03; | MS m/z | 390 | $(M + H)^+$ |
| 4-172; | A-31; | B-04; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 4-173; | A-31; | B-05; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 4-174; | A-31; | B-06; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 4-175; | A-31; | B-07; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 4-176; | A-31; | B-08; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 4-177; | A-31; | B-09; | MS m/z | 488 | (M + H)+ |
| 4-178; | A-31; | B-10; | MS m/z | 510 | (M + H)+ |
| | | | | | |



$$4-180$$
; A-31; B-12; MS m/z 522 (M + H)⁺

$$4-181$$
; A-32; B-01; MS m/z 454 (M + H)⁺

$$4-182$$
; $A-32$; $B-02$; $MS m/z$ 458 $(M + H)^+$

$$4-183$$
; A-32; B-03; MS m/z 416 (M + H)⁺

$$4-184$$
; A-32; B-04; MS m/z 474 (M + H)⁺

$$4-185$$
; A-32; B-05; MS m/z 486 (M + H)*

$$4-186$$
; A-32; B-06; MS m/z 526 (M + H)⁺

$$4-187$$
; A-32; B-07; MS m/z 506 (M + H)⁺

$$4-188$$
; A-32; B-08; MS m/z 512 (M + H)⁺

$$4-189$$
; A-32; B-09; MS m/z 514 (M + H)⁺

$$4-190$$
; A-32; B-10; MS m/z 536 (M + H)⁺

$$4-191$$
; A-32; B-11; MS m/z 540 (M + H)⁺

$$4-192$$
; A-32; B-12; MS m/z 548 (M + H)⁺

(e) 化合物(I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-R5、機器データの順に示す。

5-1; A-09; B-01; MS m/z 343 (M + H)⁺

5-2; A-09; B-02; MS m/z 347 $(M + H)^+$

5-3; A-09; B-03; $MS m/z 305 (M + H)^+$

5-4; A-09; B-04; MS m/z 363 $(M + H)^+$

5-5; A-09; B-05; MS m/z 375 $(M + H)^+$

5-6; A-09; B-06; MS m/z 415 $(M + H)^+$

5-7; A-09; B-07; MS m/z 395 (M + H)⁺

5-8; A-09; B-08; MS m/z 401 $(M + H)^+$

5-9; A-09; B-09; MS m/z 403 $(M + H)^+$

| 5-10; | A-09; | B-10; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
|-------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 5-11; | A-09; | B-11; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-12; | A-09; | B-12; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 5-13; | A-10; | B-01; | MS m/z | 343 | $(M + H)^+$ |
| 5-14; | A-10; | B-02; | MS m/z | 347 | $(M + H)^+$ |
| 5-15; | A-10; | B-03; | MS m/z | 305 | $(M + H)^+$ |
| 5-16; | A-10; | B-04; | MS m/z | 363 | $(M + H)^+$ |
| 5-17; | A-10; | B-05; | MS m/z | 375 | $(M + H)^+$ |
| 5-18; | A-10; | B-06; | MS m/z | 415 | (M + H) + |
| 5-19; | A-10; | B-07; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 5-20; | A-10 ; | B-08; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 5-21; | A-10; | B-09; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 5-22; | A-10; | B-10; | MS m/z | 425 | $(M + H)_{+}$ |
| 5-23; | A-10; | B-11; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-24; | A-10; | B-12; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 5-25; | A-11; | B-01; | MS m/z | 343 | $(M + H)^+$ |
| 5-26; | A-11; | B-02; | MS m/z | 347 | $(M + H)^+$ |
| 5-27; | A-11; | B-03; | MS m/z | 305 | $(M + H)^+$ |
| 5-28; | A-11; | B-04; | MS m/z | 363 | $(M + H)^+$ |
| 5-29; | A-11; | B-05; | MS m/z | 375 | $(M + H)^+$ |
| 5-30; | A-11; | B-06; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 5-31; | A-11; | B-07; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 5-32; | A-11; | B-08; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 5-33; | A-11; | B-09; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 5-34; | A-11; | B-10; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 5-35; | A-11; | B-11; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-36; | A-11; | B-12; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 5-37; | A-12; | B-01; | MS m/z | 343 | $(M + H)^+$ |
| 5-38; | A-12; | B-02; | MS m/z | 347 | $(M + H)^+$ |

| 5-39; | A-12; | B-03; | MS m/z | 305 | (M + H) ⁺ |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 5-40; | A-12; | B-04; | MS m/z | 363 | (M + H) + |
| 5-41; | A-12; | B-05; | MS m/z | 375 | (M + H) + |
| 5-42; | A-12; | B-06; | MS m/z | 415 | (M + H) + |
| 5-43; | A-12; | B-07; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 5-44; | A-12; | B-08; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 5-45; | A-12; | B-09; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 5-46; | A-12; | B-10; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 5-47; | A-12; | B-11; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-48; | A-12; | B-12; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 5-49; | A-13; | B-01; | MS m/z | 351 | $(M + H)^+$ |
| 5-50; | A-13; | B-02; | MS m/z | 355 | (M + H) ⁺ |
| 5-51; | A-13; | B-03; | MS m/z | 313 | (M + H) + |
| 5-52; | A-13; | B-04; | MS m/z | 371 | (M + H) ⁺ |
| 5-53; | A-13; | B-05; | MS m/z | 383 | $(M + H)^+$ |
| 5-54; | A-13; | B-06; | MS m/z | 423 | (M + H) + |
| 5-55; | A-13; | B-07; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 5-56; | A-13; | B-08; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 5-57; | A-13; | B-09; | MS m/z | 411 | (M + H) + |
| 5-58; | A-13; | B-10; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 5-59; | A-13; | B-11; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 5-60; | A-13; | B-12; | MS m/z | 445 | (M + H) + |
| 5-61; | A-14; | B-01; | MS m/z | 351 | (M + H) + |
| 5-62; | A-14; | B-02; | MS m/z | 355 | (M + H) + |
| 5-63; | A-14; | B-03; | MS m/z | 313 | $(M + H)^+$ |
| 5-64; | A-14; | B-04; | MS m/z | 371 | (M + H) + |
| 5-65; | A-14; | B-05; | MS m/z | 383 | (M + H) + |
| 5-66; | A-14; | B-06; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 5-67; | A-14; | B-07; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |



PCT/JP2003/008045

| 10/519630 | 1 | 0/ | 5 | 1 | 9 | 6 | 3 | Ü |
|-----------|---|----|---|---|---|---|---|---|
|-----------|---|----|---|---|---|---|---|---|

| 5-68; | A-14; | B-08; | MS m/z | 409 | $(M + H)^{+}$ |
|-------|-------|-------|--------|-------|---------------|
| 5-69; | A-14; | B-09; | MS m/z | 411 | $(M + H)^{+}$ |
| 5-70; | A-14; | B-10; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 5-71; | A-14; | B-11; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 5-72; | A-14; | B-12; | MS m/z | 445 . | $(M + H)^+$ |
| 5-73; | A-15; | B-01; | MS m/z | 359 | $(M + H)^+$ |
| 5-74; | A-15; | B-02; | MS m/z | 363 | $(M + H)^+$ |
| 5-75; | A-15; | B-03; | MS m/z | 321 | (M + H)+ |
| 5-76; | A-15; | B-04; | MS m/z | 379 | (M + H)+ |
| 5-77; | A-15; | B-05; | MS m/z | 391 | (M + H) + |
| 5-78; | A-15; | B-06; | MS m/z | 431 | (M + H) + |
| 5-79; | A-15; | B-07; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 5-80; | A-15; | B-08; | MS m/z | 417 | (M + H)+ |
| 5-81; | A-15; | B-09; | MS m/z | 419 | (M + H)+ |
| 5-82; | A-15; | B-10; | MS m/z | 441 | (M + H)* |
| 5-83; | A-15; | B-11; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 5-84; | A-15; | B-12; | MS m/z | 453 | $(M + H)_{+}$ |
| 5-85; | A-16; | B-01; | MS m/z | 365 | $(M + H)^+$ |
| 5-86; | A-16; | B-02; | MS m/z | 369 | $(M + H)^+$ |
| 5-87; | A-16; | B-03; | MS m/z | 327 | (M + H)+ |
| 5-88; | A-16; | B-04; | MS m/z | 385 | $(M + H)^+$ |
| 5-89; | A-16; | B-05; | MS m/z | 397 | (M + H)+ |
| 5-90; | A-16; | B-06; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 5-91; | A-16; | B-07; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 5-92; | A-16; | B-08; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 5-93; | A-16; | B-09; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 5-94; | A-16; | B-10; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 5-95; | A-16; | B-11; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 5-96; | A-16; | B-12; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |

| 5-97; | A-17; | B-01; | MS m/z | 371 | (M + H) + |
|--------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 5-98; | A-17; | B-02; | MS m/z | 375 | $(M + H)^+$ |
| 5-99; | A-17; | B-03; | MS m/z | 333 | $(M + H)^+$ |
| 5-100; | A-17; | B-04; | MS m/z | 391 | (M + H) + |
| 5-101; | A-17; | B-05; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
| 5-102; | A-17; | B-06; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 5-103; | A-17; | B-07; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 5-104; | A-17; | B-08; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-105; | A-17; | B-09; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 5-106; | A-17; | B-10; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 5-107; | A-17; | B-11; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 5-108; | A-17; | B-12; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 5-109; | A-18; | B-01; | MS m/z | 387 | (M + H) + |
| 5-110; | A-18; | B-02; | MS m/z | 391 | $(M + H)^+$ |
| 5-111; | A-18; | B-03; | MS m/z | 349 | $(M + H)^+$ |
| 5-112; | A-18; | B-04; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 5-113; | A-18; | B-05; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 5-114; | A-18; | B-06; | MS m/z | 459 | (M + H) + |
| 5-115; | A-18; | B-07; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 5-116; | A-18; | B-08; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 5-117; | A-18; | B-09; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 5-118; | A-18; | B-10; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 5-119; | A-18; | B-11; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 5-120; | A-18; | B-12; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 5-121; | A-19; | B-01; | MS m/z | 363 | $(M + H)^+$ |
| 5-122; | A-19; | B-02; | MS m/z | 367 | $(M + H)^+$ |
| 5-123; | A-19 ; | B-03; | MS m/z | 325 | $(M + H)^+$ |
| 5-124; | A-19; | B-04; | MS m/z | 383 | $(M + H)^{+}$ |
| 5-125; | A-19; | B-05; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |

| 5-126; | A-19; | B-06; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|--------|-----|----------------------|
| 5-127; | A-19; | B-07; | MS m/z | 415 | (M + H) + |
| 5-128; | A-19; | B-08; | MS m/z | 421 | (M + H) + |
| 5-129; | A-19; | B-09; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 5-130; | A-19; | B-10; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 5-131; | A-19; | B-11; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 5-132; | A-19; | B-12; | MS m/z | 457 | (M + H) + |
| 5-133; | A-20 ; | B-01; | MS m/z | 367 | (M + H)+ |
| 5-134; | A-20; | B-02; | MS m/z | 371 | $(M + H)^+$ |
| 5-135; | A-20; | B-03; | MS m/z | 329 | (M + H)+ |
| 5-136; | A-20; | B-04; | MS m/z | 387 | (M + H)+ |
| 5-137; | A-20; | B-05; | MS m/z | 399 | (M + H)+ |
| 5-138; | A-20; | B-06; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 5-139; | A-20; | B-07; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 5-140; | A-20; | B-08; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 5-141; | A-20; | B-09; | MS m/z | 427 | (M + H)+ |
| 5-142; | A-20; | B-10; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 5-143; | A-20; | B-11; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| 5-144; | A-20; | B-12; | MS m/z | 461 | (M + H) ⁺ |
| 5-145; | A-21; | B-01; | MS m/z | 373 | $(M + H)^+$ |
| 5-146; | A-21; | B-02; | MS m/z | 377 | $(M + H)^+$ |
| 5-147; | A-21; | B-03; | MS m/z | 335 | (M + H)+ |
| 5-148; | A-21; | B-04; | MS m/z | 393 | $(M + H)^+$ |
| 5-149; | A-21; | B-05; | MS m/z | 405 | (M + H)+ |
| 5-150; | A-21; | B-06; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 5-151; | A-21; | B-07; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 5-152; | A-21; | B-08; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 5-153; | A-21; | B-09; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 5-154; | A-21; | B-10; | MS m/z | 455 | $(M + H)^{+}$ |

| 5-155; | A-21; | B-11; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|------------|---------------|
| 5-156; | A-21; | B-12; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 5-157; | A-22; | B-01; | MS m/z | 397 | $(M + H)^+$ |
| 5-158; | A-22; | B-02; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 5-159; | A-22; | B-03; | MS m/z | 359 | $(M + H)^+$ |
| 5-160; | A-22; | B-04; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 5-161; | A-22; | B-05; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 5-162; | A-22; | B-06; | MS m/z | 469 | $(M + H)^+$ |
| 5-163; | A-22; | B-07; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 5-164; | A-22; | B-08; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 5-165; | A-22; | B-09; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 5-166; | A-22; | B-10; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 5-167; | A-22; | B-11; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 5-168; | A-22; | B-12; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 5-169; | A-23; | B-01; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 5-170; | A-23; | B-02; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 5-171; | A-23; | B-03; | MS m/z | 363 | $(M + H)^+$ |
| 5-172; | A-23; | B-04; | MS m/z | 421 | $(M + H)_{+}$ |
| 5-173; | A-23; | B-05; | MS m/z | 433 | (M + H)+ |
| 5-174; | A-23; | B-06; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 5-175; | A-23; | B-07; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 5-176; | A-23; | B-08; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 5-177; | A-23; | B-09; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 5-178; | A-23; | B-10; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 5-179; | A-23; | B-11; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 5-180; | A-23; | B-12; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 5-181; | A-24; | B-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^+$ |
| 5-182; | A-24; | B-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 5-183; | A-24; | B-03; | MS m/z | 367 | $(M + H)^{+}$ |

5-184; A-24; B-04; MS m/z 425 (M + H)⁺

5-185; A-24; B-05; MS m/z 437 (M + H)⁺

5-186; A-24; B-06; MS m/z 477 (M + H)⁺

5-187; A-24; B-07; MS m/z 457 (M + H)⁺

5-188; A-24; B-08; MS m/z 463 (M + H)⁺

5-189; A-24; B-09; MS m/z 465 (M + H)⁺

5-190; A-24; B-10; MS m/z 487 (M + H)⁺

5-191; A-24; B-11; MS m/z 491 $(M + H)^+$

5-192; A-24; B-12; MS m/z 499 (M + H)⁺

(f) 化合物 (I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-NR6R7、機器データの順に示す。

6-1; A-09; C-25; MS m/z 437 (M + H)⁺

6-2; A-09; C-26

6-3; A-09; C-27; MS m/z 457 $(M + H)^+$

6-4; A-09; C-28; MS m/z $560 (M + H)^+$

6-5; A-09; C-29; MS m/z 463 (M + H)⁺

6-6; A-09; C-30; MS m/z 479 $(M + H)^+$

6-7; A-09; C-31; MS m/z 479 $(M + H)^+$

6-8; A-09; C-32; MS m/z 505 $(M + H)^+$

6-9; A-09; C-33; MS m/z 517 $(M + H)^+$

6-10; A-09; C-34; MS m/z 525 (M + H)⁺

6-11; A-09; C-35; MS m/z 534 $(M + H)^+$

6-12; A-09; C-36; MS m/z 529 $(M + H)^+$

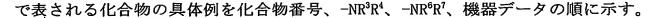
6-13; A-10; C-25; MS m/z 437 $(M + H)^+$

6-14; A-10; C-26

| 6-15; | A-10; | C-27; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|---------|-----|----------------------|
| 6-16; | A-10; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 6-17; | A-10; | C-29; | MS m/z | 463 | (M + H) + |
| 6-18; | A-10; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 6-19; | A-10; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 6-20; | A-10; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 6-21; | A-10; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 6-22; | A-10; | C-34 | | | |
| 6-23; | A-10; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 6-24; | A-10; | C-36; | MS m/z | 529 | (M + H) + |
| 6-25; | A-11; | C-25; | MS m/z | 437 | (M + H) ⁺ |
| 6-26; | A-11; | C-26 | | | |
| 6-27; | A-11; | C-27; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 6-28; | A-11; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 6-29; | A-11; | C-29; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 6-30; | A-11; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 6-31; | A-11; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 6-32; | A-11; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 6-33; | A-11; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 6-34; | A-11; | C-34; | .MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 6-35; | A-11; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 6-36; | A-11; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 6-37; | A-12; | C-25; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 6-38; | A-12; | C-26 | | | |
| 6-39; | A-12; | C-27; | MS m/z | 457 | (M + H)+ |
| 6-40; | A-12; | C-28; | MS m/z | 560 | (M + H) + |
| 6-41; | A-12; | C-29; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 6-42; | A-12; | C-30; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 6-43; | A-12; | C-31; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |

| 6-44; | A-12; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 6-45; | A-12; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 6-46; | A-12; | C-34 | | | |
| 6-47; | A-12; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^{+}$ |
| 6-48; | A-12; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 6-49; | A-13; | C-25; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 6-50; | A-13; | C-26 | | | |
| 6-51; | A-13; | C-27; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 6-52; | A-13; | C-28; | MS m/z | 568 | (M + H)+ |
| 6-53; | A-13; | C-29; | MS m/z | 471 | (M·+ H)+ |
| 6-54; | A-13; | C-30; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 6-55; | A-13; | C-31; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 6-56; | A-13; | C-32; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 6-57; | A-13; | C-33; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 6-58; | A-13; | C-34; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 6-59; | A-13; | C-35; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 6-60; | A-13; | C-36; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 6-61; | A-14; | C-25; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 6-62; | A-14; | C-26 | | | , |
| 6-63; | A-14; | C-27; | MS m/z | 465 | (M + H) ⁺ |
| 6-64; | A-14; | C-28; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 6-65; | A-14; | C-29; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 6-66; | A-14; | C-30; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 6-67; | A-14; | C-31; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 6-68; | A-14; | C-32; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 6-69; | A-14; | C-33; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 6-70; | A-14; | C-34 | | | |
| 6-71; | A-14; | C-35; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 6-72; | A-14; | C-36; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 6-73; | A-15; | C-25; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|----------|--------|-----|----------------------|
| 6-74; | A-15; | C-26 | | | |
| 6-75; | A-15; | C-27; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 6-76; | A-15; | C-28; | MS m/z | 576 | (M + H) ⁺ |
| 6-77; | A-15; | C-29; | MS m/z | 479 | (M + H) ⁺ |
| 6-78; | A-15; | C-30; | MS m/z | 495 | (M + H) + |
| 6-79; | A-15; | C-31; | MS m/z | 495 | (M + H) + |
| 6-80; | A-15; | C-32; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 6-81; | A-15; | C-33; | MS m/z | 533 | (M + H) + |
| 6-82; | A-15; | C-34 | | | |
| 6-83; | A-15; | . C-35 ; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 6-84; | A-15; | C-36; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 6-85; | A-16; | C-25; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 6-86; | A-16; | C-26 | | | |
| 6-87; | A-16; | C-27; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 6-88; | A-16; | C-28; | MS m/z | 582 | $(M + H)^+$ |
| 6-89; | A-16; | C-29; | MS m/z | 485 | (M + H) + |
| 6-90; | A-16; | C-30; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 6-91; | A-16; | C-31; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 6-92; | A-16; | C-32; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 6-93; | A-16; | C-33; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 6-94; | A-16; | C-34 | | | |
| 6-95; | A-16; | C-35; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 6-96; | A-16; | C-36; | MS m/z | 551 | $(M + H)^{+}$ |
| (g) 们 | 公合物(I |)のうち | ` | | |



| 7-1; | A-01; | C-01; | MS m/z | 354 | $(M + H)^+$ |
|------|-------|-------|--------|-----|-------------|
|------|-------|-------|--------|-----|-------------|

$$7-2$$
; A-01; C-02; MS m/z 366 (M + H)⁺

$$7-3$$
; A-01; C-03; MS m/z 378 (M + H)⁺

$$7-4$$
; A-01; C-04; MS m/z 382 (M + H)⁺

$$7-5$$
; A-01; C-05; MS m/z 384 (M + H)⁺

$$7-6$$
; A-01; C-06; MS m/z 392 (M + H)⁺

7-7; A-01; C-07; MS m/z 394
$$(M + H)^+$$

7-8; A-01; C-08; MS m/z 410
$$(M + H)^+$$

7-9; A-01; C-09; MS m/z 416
$$(M + H)^+$$

$$7-10$$
; A-01; C-10; MS m/z 422 (M + H)⁺

$$7-11$$
; A-01; C-11; MS m/z 430 (M + H)⁺

$$7-12$$
; A-01; C-12; MS m/z 436 (M + H)⁺

$$7-13$$
; A-01; C-13; MS m/z 446 (M + H)⁺

$$7-14$$
; A-01; C-14; MS m/z 452 (M + H)⁺

$$7-15$$
; A-01; C-16; MS m/z 462 (M + H)⁺

$$7-16$$
; A-01; C-17; MS m/z 470 (M + H)⁺

$$7-17$$
; A-01; C-18; MS m/z 434 (M + H)⁺

$$7-18$$
; A-01; C-19; MS m/z 382 (M + H)⁺

$$7-19$$
; A-01; C-20; MS m/z 475 (M + H)⁺

$$7-20$$
; A-01; C-21; MS m/z 397 (M + H)⁺

$$7-21$$
; $A-01$; $C-22$; $MS m/z$ 423 $(M + H)^+$

$$7-22$$
; A-01; C-23; MS m/z 437 (M + H)⁺

$$7-23$$
; A-01; C-24; MS m/z 458 (M + H)⁺

$$7-24$$
; A-01; C-25; MS·m/z 383 (M + H)⁺

$$7-25$$
; A-01; C-26; MS m/z 395 (M + H)⁺

$$7-26$$
; A-01; C-27; MS m/z 403 (M + H)⁺

$$7-27$$
; A-01; C-28; MS m/z 506 (M + H)⁺

$$7-28$$
; A-01; C-29; MS m/z 409 (M + H)⁺

| 7-29; | A-01; | C-30; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 7-30; | A-01; | C-31; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-31; | A-01; | C-32; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-32; | A-01; | C-33; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 7-33; | A-01; | C-34; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 7-34; | A-01; | C-35; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-35; | A-01; | C-36; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-36; | A-01; | C-48; | MS m/z | 456 | (M + H)+ |
| 7-37; | A-02; | C-01; | MS m/z | 366 | (M + H)+ |
| 7-38; | A-02; | C-02; | MS m/z | 378 | $(M + H)^+$ |
| 7-39; | A-02; | C-03; | MS m/z | 390 | (M + H)+ |
| 7-40; | A-02; | C-04; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-41; | A-02; | C-05; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 7-42; | A-02; | C-06; | MS m/z | 404 | $(M + H)^+$ |
| 7-43; | A-02; | C-07; | MS m/z | 406 | (M + H)+ |
| 7-44; | A-02; | C-08; | MS m/z | 422 | (M + H)+ |
| 7-45; | A-02; | C-09; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-46; | A-02; | C-10; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 7-47; | A-02; | C-11; | MS m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 7-48; | A-02; | C-12; | MS m/z | 448 | $(M + H)_+$ |
| 7-49; | A-02; | C-13; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-50; | A-02; | C-14; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-51; | A-02; | C-16; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-52; | A-02; | C-17; | MS m/z | 482 | (M + H) + |
| 7-53; | A-02; | C-18; | MS m/z | 446 | (M + H)+ |
| 7-54; | A-02; | C-19; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-55; | A-02; | C-20; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 7-56; | A-02; | C-21; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 7-57; | A-02; | C-22; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |

| 7-58; | A-02; | C-23; | MS m/z | 449 | (M + H)* |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-59; | A-02; | C-24; | MS m/z | 470 | (M + H)+ |
| 7-60; | A-02; | C-25; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 7-61; | A-02; | C-26; | MS m/z | 407 | (M + H) + |
| 7-62; | A-02; | C-27; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 7-63; | A-02; | C-28; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-64; | A-02; | C-29; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 7-65; | A-02; | C-30; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-66; | A-02; | C-31; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-67; | A-02; | C-32; | MS m/z | 463 | (M + H) + |
| 7-68; | A-02; | C-33; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-69; | A-02; | C-34; | MS m/z | 483 | (M + H)+ |
| 7-70; | A-02; | C-35; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-71; | A-02; | C-36; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-72; | A-02; | C-48; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 7-73; | A-03; | C-01; | MS m/z | 366 | $(M + H)^+$ |
| 7-74; | A-03; | C-02; | MS m/z | 378 | $(M + H)^+$ |
| 7-75; | A-03; | C-03; | MS m/z | 390 | $(M + H)^+$ |
| 7-76; | A-03; | C-04; | MS m/z | 394 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-77; | A-03; | C-05; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 7-78; | A-03; | C-06; | MS m/z | 404 | $(M + H)^+$ |
| 7-79; | A-03; | C-07; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| 7-80; | A-03; | C-08; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-81; | A-03; | C-09; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-82; | A-03; | C-10; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 7-83; | A-03; | C-11; | MS m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 7-84; | A-03; | C-12; | MS m/z | 448 | (M + H) ⁺ |
| 7-85; | A-03; | C-13; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-86; | A-03; | C-14; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-87; | A-03; | C-16; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-88; | A-03; | C-17; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-89; | A-03; | C-18; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-90; | A-03; | C-19; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-91; | A-03; | C-20; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-92; | A-03; | C-21; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 7-93; | A-03; | C-22; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 7-94; | A-03; | C-23; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-95; | A-03; | C-24; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-96; | A-03; | C-25; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 7-97; | A-03; | C-26; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 7-98; | A-03; | C-27; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 7-99; | A-03; | C-28; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-100; | A-03; | C-29; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 7-101; | A-03; | C-30; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-102; | A-03; | C-31; | MS m/z | 437 | (M + H) ⁺ |
| 7-103; | A-03; | C-32; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-104; | A-03; | C-33; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-105; | A-03; | C-34; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 7-106; | A-03; | C-35; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-107; | A-03; | C-36; | MS m/z | 487 | (M + H) ⁺ |
| 7-108; | A-03; | C-48; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 7-109; | A-04; | C-01; | MS m/z | 368 | $(M + H)^+$ |
| 7-110; | A-04; | C-02; | MS m/z | 380 | $(M + H)^+$ |
| 7-111; | A-04; | C-03; | MS m/z | 392 | $(M + H)^+$ |
| 7-112; | A-04; | C-04; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 7-113; | A-04; | C-05; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 7-114; | A-04; | C-06; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| 7-115; | A-04; | C-07; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |

| 7-116; | A-04; | C-08; | MS m/z | 424 | (M + H)+ |
|----------------------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-117; | A-04; | C-09; | MS m/z | 430 | (M + H)+ |
| 7-118; | A-04; | C-10; | MS m/z | 436 | (M + H)+ |
| 7-119; | A-04; | C-11; | MS m/z | 444 | (M + H) ⁺ |
| 7-120; | A-04; | C-12; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 7-121; | A-04; | C-13; | MS m/z | 460 | (M + H)+ |
| 7-122; | A-04; | C-14; | MS m/z | 466 | (M + H) ⁺ |
| 7-123; | A-04; | C-16; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-124; | A-04; | C-17; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| ₋ 7-125 ; | A-04; | C-18; | MS m/z | 448 | (M + H) ⁺ |
| ₹7−126 ; | A-04; | C-19; | MS m/z | 396 | (M + H) + |
| 7-127; | A-04; | C-20; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-128; | A-04; | C-21; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 7-129; | A-04; | C-22; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-130; | A-04; | C-23; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-131; | A-04; | C-24; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 7-132; | A-04; | C-25; | MS m/z | 397 | $(M + H)^+$ |
| 7-133; | A-04; | C-26; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 7-134; | A-04; | C-27; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 7-135; | A-04; | C-28; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-136; | A-04; | C-29; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 7-137; | A-04; | C-30; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 7-138; | A-04; | C-31; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 7-139; | A-04; | C-32; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-140; | A-04; | C-33; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-141; | A-04; | C-34; | MS m/z | 485 | (M + H) + |
| 7-142; | A-04; | C-35; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-143; | A-04; | C-36; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |

7-144; A-04; C-48; MS m/z

470 $(M + H)^+$

| 7 145 | 4 05 | 0.01 | 3/0 / | 000 | (14 . 11) + |
|--------|-------|--------|--------|-----|----------------------|
| 7-145; | A-05; | C-01; | MS m/z | 382 | $(M + H)^+$ |
| 7-146; | A-05; | C-02; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-147; | A-05; | C-03; | MS m/z | 406 | (M + H) |
| 7-148; | A-05; | C-04; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 7-149; | A-05; | C-05; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 7-150; | A-05; | .C-06; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-151; | A-05; | C-07; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-152; | A-05; | C-08; | MS m/z | 438 | (M + H) + |
| 7-153; | A-05; | C-09; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-154; | A-05; | C-10; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 7-155; | A-05; | C-11; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-156; | A-05; | C-12; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-157; | A-05; | C-13; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-158; | A-05; | C-14; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-159; | A-05; | C-16; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-160; | A-05; | C-17; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-161; | A-05; | C-18; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-162; | A-05; | C-19; | MS m/z | 410 | (M + H) ⁺ |
| 7-163; | A-05; | C-20; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-164; | A-05; | C-21; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 7-165; | A-05; | C-22; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-166; | A-05; | C-23; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-167; | A-05; | C-24; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-168; | A-05; | C-25; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 7-169; | A-05; | C-26; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 7-170; | A-05; | C-27; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 7-171; | A-05; | C-28; | MS m/z | 534 | (M + H) + |
| 7-172; | A-05; | C-29; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 7-173; | A-05; | C-30; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-174; | A-05; | C-31; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-175; | A-05; | C-32; | MS m/z | 479 | (M + H) ⁺ |
| 7-176; | A-05; | C-33; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-177; | A-05; | C-34; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-178; | A-05; | C-35; | MS m/z | 508 | (M + H)+ |
| 7-179; | A-05; | C-36; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-180; | A-05; | C-37; | MS m/z | 467 | (M + H) + |
| 7-181; | A-05; | C-38; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 7-182; | A-05; | C-39; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-183; | A-05; | C-40; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-184; | A-05; | C-41; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 7-185; | A-05; | C-42; | MS m/z | 451 | (M + H) + |
| 7-186; | A-05; | C-43; | MS m/z | 451 | (M + H) |
| 7-187; | A-05; | C-44; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 7-188; | A-05; | C-45; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-189; | A-05; | C-46; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-190; | A-05; | C-47; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-191; | A-05; | C-48; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-192; | A-06; | C-01; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 7-193; | A-06; | C-02; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 7-194; | A-06; | C-03; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-195; | A-06; | C-04; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 7-196; | A-06; | C-05; | MS m/z | 414 | $(M + H)^+$ |
| 7-197; | A-06; | C-06; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-198; | A-06; | C-07; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 7-199; | A-06; | C-08; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-200; | A-06; | C-09; | MS m/z | 446 | (M + H)+ |
| 7-201 ; | A-06; | C-10; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 7-202; | A-06; | C-11; | MS m/z | 460 | (M + H) ⁺ |

| 7-203; | A-06; | C-12; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-204; | A-06; | C-13; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-205; | A-06; | C-14; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-206; | A-06; | C-16; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-207; | A-06; | C-17; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-208; | A-06; | C-18; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-209; | A-06; | C-19; | MS m/z | 412 | (M + H).+ |
| 7-210; | A-06; | C-20; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-211; | A-06; | C-21; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 7-212; | A-06; | C-22; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-213; | A-06; | C-23; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-214; | A-06; | C-24; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-215; | A-06; | C-25; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 7-216; | A-06; | C-26; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 7-217; | A-06; | C-27; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 7-218; | A-06; | C-28; | MS m/z | 536 | $(M + H)^+$ |
| 7-219; | A-06; | C-29; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 7-220; | A-06; | C-30; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 7-221; | A-06; | C-31; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 7-222; | A-06; | C-32; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-223; | A-06; | C-33; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-224; | A-06; | C-34; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-225; | A-06; | C-35; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 7-226; | A-06; | C-36; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-227; | A-06; | C-48; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-228; | A-07; | C-01; | MS m/z | 382 | $(M + H)^+$ |
| 7-229; | A-07; | C-02; | MS m/z | 394 | (M + H) + |
| 7-230; | A-07; | C-03; | MS m/z | 406 | (M + H) ⁺ |
| 7-231; | A-07; | C-04; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |

| 7-232; | A-07; | C-05; | MS m/z | 412 | (M + H) ⁺ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-233; | A-07; | C-06; | MS m/z | 420 | (M + H) ⁺ |
| 7-234; | A-07; | C-07; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-235; | A-07; | C-08; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 7-236; | Ā-07; | C-09; | MS m/z | 444 | (M + H)+ |
| 7-237; | A-07; | C-10; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 7-238; | A-07; | C-11; | MS m/z | 458 | (M + H) ⁺ |
| 7-239; | A-07; | C-12; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-240; | A-07; | C-13; | MS m/z | 474 | (M + H)+ |
| 7-241; | A-07; | C-14; | MS m/z | 480 | (M + H)+ |
| 7-242; | A-07; | C-16; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-243; | A-07; | C-17; | MS m/z | 498 | (M + H)+ |
| 7-244; | A-07; | C-18; | MS m/z | 462 | (M + H)+ |
| 7-245; | A-07; | C-19; | MS m/z | 410 | (M + H)+ |
| 7-246; | A-07; | C-20; | MS m/z | 503 | (M + H) + |
| 7-247; | A-07; | C-21; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-248; | A-07; | C-22; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 7-249; | A-07; | C-23; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 7-250; | A-07; | C-24; | MS m/z | 486 | (M + H)+ |
| 7-251; | A-07; | C-25; | MS m/z | 411 | (M + H) ⁺ |
| 7-252; | A-07; | C-26; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 7-253; | A-07; | C-27; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 7-254; | A-07; | C-28; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-255; | A-07; | C-29; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-256; | A-07; | C-30; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| 7-257; | A-07; | C-31; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| 7-258; | A-07; | C-32; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 7-259; | A-07; | C-33; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 7-260; | A-07; | C-34; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |

| 7-261; | A-07; | C-35; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|--------|--------|-----|----------------------|
| 7-262; | A-07; | C-36; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-263; | A-07; | C-48; | MS m/z | 484 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-264; | A-08; | C-01; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 7-265; | A-08; | C-02; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 7-266; | A-08; | C-03; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-267; | A-08; | C-04; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 7-268; | A-08; | C-05; | MS m/z | 414 | $(M + H)^+$ |
| 7-269; | A-08; | C-06; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-270 ; | A-08; | C-07; | MS m/z | 424 | (M + H) + |
| 7-271; | A-08; | C-08; | MS m/z | 440 | (M + H)+ |
| 7-272; | A-08; | C-09; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-273; | A-08; | _C-10; | MS m/z | 452 | (M. + H) + |
| 7-274; | A-08; | C-11; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 7-275; | A-08; | C-12; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-276; | A-08; | C-13; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-277; | A-08; | C-14; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-278; | A-08; | C-16; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-279; | A-08; | C-17; | MS m/z | 500 | (M + H)+ |
| 7-280; | A-08; | C-18; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-281; | A-08; | C-19; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 7-282; | A-08; | C-20; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-283; | A-08; | C-21; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 7-284; | A-08; | C-22; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-285; | A-08; | C-23; | MS m/z | 467 | (M + H) ₊ |
| 7-286; | A-08; | C-24; | MS m/z | 488 | (M + H) + |
| 7-287; | A-08; | C-25; | MS m/z | 413 | $(M + H)^+$ |
| 7-288; | A-08; | C-26; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-289; | A-08; | C-27; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

.

| 7-290; | A-08; | C-28; | MS m/z | 536 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-291; | A-08; | C-29; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 7-292; | A-08; | C-30; | MS m/z | 455 | (M + H)+ |
| 7-293; | A-08; | C-31; | MS m/z | 455 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-294; | A-08; | C-32; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-295; | A-08; | C-33; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-296; | A-08; | C-34; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-297; | A-08; | C-35; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 7-298; | A-08; | C-36; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-299; | A-08; | C-48; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-300; | A-09; | C-01; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-301; | A-09; | C-02; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-302; | A-09; | C-03; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-303; | A-09; | C-04; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-304; | A-09; | C-05; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 7-305; | A-09; | C-06; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-306; | A-09; | C-07; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-307; | A-09; | C-08; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-308; | A-09; | C-09; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-309; | A-09; | C-10; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-310; | A-09; | C-11; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-311; | A-09; | C-12; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-312; | A-09; | C-13; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-313; | A-09; | C-14; | MS m/z | 506 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-314; | A-09; | C-15; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-315; | A-09; | C-16; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-316; | A-09; | C-17; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-317; | A-09; | C-18; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-318; | A-09; | C-19; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |

| 7-319; | A-09; | C-20; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-320; | A-09; | C-21; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-321; | A-09; | C-22; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-322; | A-09; | C-23; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-323; | A-09; | C-24; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-324; | A-09; | C-25; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-325; | A-09; | C-26; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-326; | A-09; | C-27; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 7-327; | A-09; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 7-328; | A-09; | C-29; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 7-329; | A-09; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-330; | A-09; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-331; | A-09; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-332; | A-09; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-333; | A-09; | C-34; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-334; | A-09; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-335; | A-09; | C-36; | MS m/z | 529 | (M + H) |
| 7-336; | A-10; | C-01; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-337; | A-10; | C-02; | MS m/z | 420 | (M + H) |
| 7-338; | A-10; | C-03; | MS m/z | 432 | (M + H) |
| 7-339; | A-10; | C-04; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-340; | A-10; | C-05; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 7-341; | A-10; | C-06; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-342; | A-10; | C-07; | MS m/z | 448 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-343; | A-10; | C-08; | MS m/z | 464 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-344; | A-10; | C-09; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-345; | A-10; | C-10; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-346; | A-10; | C-11; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-347 ; | A-10; | C-12; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-348; | A-1.0; | C-13; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
|--------|--------|-------|--------|-------|----------------------|
| 7-349; | A-10; | C-14; | MS m/z | 506 | (M + H) ⁺ |
| 7-350; | A-10; | C-15; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-351; | A-10; | C-16; | MS m/z | 516 | (M + H)+ |
| 7-352; | A-10; | C-17; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-353; | A-10; | C-18; | MS m/z | 436 | (M + H) + |
| 7-354; | A-10; | C-19; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-355; | A-10; | C-20; | MS m/z | 529 | (M + H)+ |
| 7-356; | A-10; | C-21; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 7-357; | A-10; | C-22; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 7-358; | A-10; | C-23; | MS m/z | 491 | (M + H) + |
| 7-359; | A-10; | C-24; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-360; | A-10; | C-25; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-361; | A-10; | C-26; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-362; | A-10; | C-27; | MS m/z | 457 | (M + H) ⁺ |
| 7-363; | A-10; | C-28; | MS m/z | 560 | (M + H)+ |
| 7-364; | A-10; | C-29; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-365; | A-10; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-366; | A-10; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-367; | A-10; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-368; | A-10; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-369; | A-10; | C-34; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-370; | A-10; | C-35; | MS m/z | 534 | (M + H)+ |
| 7-371; | A-10; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-372; | A-11; | C-01; | MS m/z | 408 . | $(M + H)^+$ |
| 7-373; | A-11; | C-02; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-374; | A-11; | C-03; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-375; | A-11; | C-04; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-376; | A-11; | C-05; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-377; | A-11; | C-06; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|----------|-------|-----------------------|
| 7-378; | A-11; | C-07; | MS m/z | 448 | (M + H)+ |
| | | C-08; | MS m/z | 464 | (M +. H) ⁺ |
| 7-379; | A-11; | • | | | |
| 7-380; | A-11; | C-09; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-381; | A-11; | C-10; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-382; | A-11; | C-11; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-383; | A-11; | C-12; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-384; | A-11; | C-13; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-385; | A-11; | C-14; | MS m/z | 506 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-386; | A-11; | C-15; | MS m/z · | 524 · | $(M + H)_{+}$ |
| 7-387; | A-11; | C-16; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-388; | A-11; | C-17; | MS m/z | 524 | (M + H)+ |
| 7-389; | A-11; | C-18; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-390; | A-11; | C-19; | MS m/z | 488 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-391; | A-11; | C-20; | MS m/z | 529 | (M + H) ⁺ |
| 7-392; | A-11; | C-21; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-393; | A-11; | C-22; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 7-394; | A-11; | C-23; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-395; | A-11; | C-24; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-396; | A-11; | C-25; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 7-397; | A-11; | C-26; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 7-398; | A-11; | C-27; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 7-399; | A-11; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | $(M + H)^+$ |
| 7-401; | A-11·; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-402; | A-11; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-403; | A-11; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-404; | A-11; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-405; | A-11; | C-34; | MS m∕z | 525 | $(M + H)^+$ |



| 7-406; | A-11; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
|---------|--------|-------|--------|-----|-------------------------|
| 7-407; | A-11 ; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-408; | A-12; | C-01; | MS m/z | 408 | (M + H)+ |
| 7-409; | A-12; | C-02; | MS m/z | 420 | (M + H) + |
| 7-410; | A-12; | C-03; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-411; | A-12; | C-04; | MS m/z | 436 | (M + H)+ |
| 7-412; | A-12; | C-05; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 7-413; | A-12; | C-06; | MS m/z | 446 | $(M + H)^{\frac{1}{4}}$ |
| 7-414; | A-12 ; | C-07; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-415; | A-12; | C-08; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-416; | A-12; | C-09; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-417; | A-12; | C-10; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
| 7-418; | A-12; | C-11; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-419; | A-12; | C-12; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-420 ; | A-12; | C-13; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-421; | A-12; | C-14; | MS m/z | 506 | $(M + H)_+$ |
| 7-422; | A-12; | C-15; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-423; | A-12; | C-16; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-424; | A-12; | C-17; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-425; | A-12; | C-18; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-426; | A-12; | C-19; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-427; | A-12; | C-20; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-428; | A-12; | C-21; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-429; | A-12; | C-22; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-430; | A-12; | C-23; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-431; | A-12; | C-24; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-432; | A-12; | C-25; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-433; | A-12; | C-26; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-434; | A-12; | C-27; | MS m/z | 457 | (M + H) + |
| | | | | | |

| 7-435; | A-12; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|----------|------|----------------------|
| 7-436; | A-12; | C-29; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-437; | A-12; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-438; | A-12; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-439; | A-12; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-440; | A-12; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-441; | A-12; | C-34; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-442; | A-12; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-443; | A-12; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-444; | A-13 ; | C-01; | MS m/z·· | 416 | $(M + H)^+$ |
| 7-445; | A-13; | C-02; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-446; | A-13; | C-03; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-447; | A-13; | C-04; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-448; | A-13; | C-05; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-449; | A-13; | C-06; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 7-450; | A-13; | C-07; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 7-451; | A-13; | C-08; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 7-452; | A-13; | C-09; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-453; | A-13; | C-10; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-454; | A-13; | C-11; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-455; | A-13; | C-12; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-456; | A-13; | C-13; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-457; | A-13; | C-14; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-458; | A-13; | C-15; | MS m/z | ,532 | $(M + H)^+$ |
| 7-459; | A-13; | C-16; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-460; | A-13; | C-17; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-461; | A-13; | C-18; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-462; | A-13; | C-19; | MS m/z | 496 | (M + H) ⁺ |
| 7-463; | A-13; | C-20; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-464; | A-13; | C-21; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
|-----------------|--------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7 -465 ; | A-13; | C-22; | MS m/z | 485 | (M + H)+ |
| 7-466; | A-13; | C-23; | MS m/z | 499 | (M + H)+ |
| 7-467; | A-13; | C-24; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-468; | A-13; | C-25; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 7-469; | A-13; | C-26; | MS m/z | 457 | (M + H) ⁺ |
| 7-470; | A-13; | C-27; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 7-471; | A-13; | C-28; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-472; | A-13; | C-29; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 7-473; | A-13; | C-30; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-474; | A-13 ; | C-31; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 7-475; | A-13; | C-32; | MS m/z | 513 | (M + H)+ |
| 7-476; | A-13; | C-33; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-477; | A-13; | C-34; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 7-478; | A-13; | C-35; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-479; | A-13; | C-36; | MS m/z | 537 | (M + H)+ |
| 7-480; | A-14; | C-01; | MS m/z | 416 | $(M + H)^+$ |
| 7-481; | A-14; | C-02; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-482; | A-14; | C-03; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-483; | A-14; | C-04; | MS m/z | 444 | (M + H) ⁺ |
| 7-484; | A-14; | C-05; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-485; | A-14; | C-06; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 7-486; | A-14; | C-07; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 7-487; | A-14; | C-08; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 7-488; | A-14; | C-09; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-489; | A-14; | C-10; | MS m/z | 484 | (M + H)+ |
| 7-490; | A-14; | C-11; | MS m/z | 492 | (M + H) + |
| 7-491; | A-14; | C-12; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-492; | A-14; | C-13; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-493; | A-14; | C-14; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|----------|-----|----------------------|
| 7-494; | A-14; | C-15; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-495; | A-14; | C-16; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-496; | A-14; | C-17; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-497; | A-14; | C-18; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-498; | A-14; | C-19; | MS m/z | 496 | (M + H) ⁺ |
| 7-499; | A-14; | C-20; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 7-500; | A-14; | C-21; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 7-501; | A-14; | C-22; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 7-502; | A-14; | C-23; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-503; | A-14; | C-24; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-504; | A-14; | C-25; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 7-505; | A-14; | C-26; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 7-506; | A-14; | C-27; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 7-507; | A-14; | C-28; | MS m/z | 568 | (M + H)+ |
| 7-508; | A-14; | C-29; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 7-509; | A-14; | C-30; | MS m/z | 487 | (M + H) ⁺ |
| 7-510; | A-14; | C-31; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-511; | A-14; | C-32; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-512; | A-14; | C-33; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-513; | A-14; | C-34; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 7-514; | A-14; | C-35; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-515; | A-14; | C-36; | . MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 7-516; | A-14; | C-37; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-517; | A-14; | C-38; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-518; | A-14; | C-39; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-519; | A-14; | C-40; | MS m/z | 485 | (M + H) ⁺ |
| 7-520; | A-14; | C-41; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-521; | A-14; | C-42; | MS m/z | 485 | (M + H) + |

| 7-522; | A-14; | C-43; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
|--------|----------------|-------|----------|-----|---------------------|
| 7-523; | A-14; | C-44; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 7-524; | A-14; | C-45; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 7-525; | A-14; | C-46; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-526; | A-14; | C-47; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-527; | A-15; | C-01; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 7-528; | $\dot{A-15}$; | C-02; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-529; | A-15; | C-03; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-530; | A-15; | C-04; | MS m/z . | 452 | $(M + H)^+$ |
| 7-531; | A-15; | C-05; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 7-532; | A-15; | C-06; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-533; | A-15; | C-07; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-534; | A-15; | C-08; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-535; | A-15; | C-09; | MS m/z | 486 | $(M + \dot{H})_{+}$ |
| 7-536; | A-15; | C-10; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-537; | A-15; | C-11; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-538; | A-15; | C-12; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 7-539; | A-15; | C-13; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-540; | A-15; | C-14; | MS mi/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 7-541; | A-15; | C-15; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-542; | A-15; | C-16; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-543; | A-15; | C-17; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-544; | A-15; | C-18; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 7-545; | A-15; | C-19; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 7-546; | A-15; | C-20; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 7-547; | A-15; | C-21; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-548; | A-15; | C-22; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-549; | A-15; | C-23; | MS m/z | 507 | (M + H)+ |
| 7-550; | A-15; | C-24; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |

| 7-551; | A-15; | C-25; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|----------|------------------|-------------|
| 7-552; | A-15; | C-26; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-553; | A-15; | C-27; | MS m/z | 473 | $(M + H)^+$ |
| 7-554; | A-15; | C-28; | MS m/z | 576 | $(M + H)^+$ |
| 7-555; | A-15; | C-29; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-556; | A-15; | C-30; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-557; | A-15; | C-31; | MS m/z | 495 | (M + H)* |
| 7-558; | A-15; | C-32; | MS m/z | 521 | (M + H) + |
| 7-559; | A-15; | C-33; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 7-560; | A-15; | C-34; | MS m/z | 541 [.] | $(M + H)^+$ |
| 7-561; | A-15; | C-35; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-562; | A-15; | C-36; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 7-563; | A-16; | C-01; | MS m/z | 430 | $(M + H)^+$ |
| 7-564; | A-16; | C-02; | MS m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 7-565; | A-16; | C-03; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 7-566; | A-16; | C-04; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-567; | A-16; | C-05; | MS_m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 7-568; | A-16; | C-06; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 7-569; | A-16; | C-07; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-570; | A-16; | C-08; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-571; | A-16; | C-09; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-572; | A-16; | C-10; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-573; | A-16; | C-11; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 7-574; | A-16; | C-12; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-575; | A-16; | C-13; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 7-576; | A-16; | C-14; | MS m/z | 528 | (M + H)+ |
| 7-577; | A-16; | C-15; | MS m/z | 546 | (M + H)+ |

7-578; A-16; C-16;

7-579; A-16; C-17;

538

546

MS m/z

MS m/z

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

7-605;

7-606;

7-607;

7-608;

A-17;

A-17;

A-17;

A-17;

C-07;

C-08;

C-09;

C-10;

MS m/z

MS m/z

MS m/z

MS m/z

| 7-580; | A-16; | C-18; | MS m/z | 458 | (M + H)+ |
|--------|--------|--------|--------|-----|---------------|
| 7-581; | A-16; | C-19; | MS m/z | 510 | (M + H)+ |
| 7-582; | A-16; | C-20; | MS m/z | 551 | (M + H)+ |
| 7-583; | A-16; | C-21; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 7-584; | A-16; | C-22; | MS m/z | 499 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-585; | A-16; | C-23; | MS m/z | 513 | (M + H)+ |
| 7-586; | A-16; | C-24; | MS m/z | 534 | (M + H)+ |
| 7-587; | A-16; | C-25; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 7-588; | A-16; | C-26; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 7-589; | A-16; | C-27; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 7-590; | A-16; | C-28; | MS m/z | 582 | (M + H)+ |
| 7-591; | A-16; | C-29; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 7-592; | A-16 ; | C-30; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-593; | A-16; | C-31; | MS m/z | 501 | (M + H) |
| 7-594; | A-16; | C-32; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 7-595; | A-16; | C-33; | MS m/z | 539 | $(M + H)_+$ |
| 7-596; | A-16; | C-34; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 7-597; | A-16; | C-35 ; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 7-598; | A-16; | C-36; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 7-599; | A-17; | C-01; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-600; | A-17; | C-02; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-601; | A-17; | C-03; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 7-602; | A-17; | C-04; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-603; | A-17; | C-05; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 7-604; | A-17; | C-06; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

476

492

498

| 7-609; | A-17; | C-11; | MS m/z | 512 | (M + H)+ |
|--------|----------------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-610; | A-17; | C-12; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-611; | $\dot{A-17}$; | C-13; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-612; | A-17; | C-14; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-613; | A-17; | C-15; | MS m/z | 552 | $(M + H)^+$ |
| 7-614; | A-17; | C-16; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 7-615; | A-17; | C-17; | MS m/z | 552 | $(M + H)^+$ |
| 7-616; | A-17; | C-18; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-617; | A-17; | C-19; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-618; | A-17; | C-20; | MS m/z | 557 | $(M + H)^+$ |
| 7-619; | A-17; | C-21; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-620; | A-17; | C-22; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-621; | A-17; | C-23; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-622; | A-17; | C-24; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-623; | A-17; | C-25; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-624; | A-17; | C-26; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-625; | A-17; | C-27; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 7-626; | A-17; | C-28; | MS m/z | 588 | $(M + H)^+$ |
| 7-627; | A-17 ; | C-29; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-628; | A-17; | C-30; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-629; | A-17; | C-31; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-630; | A-17; | C-32; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 7-631; | A-17; | C-33; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 7-632; | A-17; | C-34; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 7-633; | A-17; | C-35; | MS m/z | 562 | $(M + H)^+$ |
| 7-634; | A-17; | C-36; | MS m/z | 557 | (M + H) + |
| 7-635; | A-17; | C-37; | MS m/z | 521 | (M + H) + |
| 7-636; | A-17; | C-38; | MS m/z | 534 | (M + H) ⁺ |
| 7-637; | A-17; | C-39; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |

| 7-638; | A-17; | C-40; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-------|---------------|
| 7-639; | A-17; | C-41; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-640; | A-17; | C-42; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-641; | A-17; | C-43; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-642; | A-17; | C-44; | MS m/z | 493 | (M + H)+ |
| 7-643; | A-17; | C-45; | MS m/z | 505 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-644; | A-17; | C-46; | MS m/z | . 502 | $(M + H)^+$ |
| 7-645; | A-17; | C-47; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-646; | A-18; | C-01; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 7-647; | A-18; | C-02; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-648; | A-18; | C-03; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-649; | A-18; | C-04; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 7-650; | A-18; | C-05; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-651; | A-18; | C-06; | MS m/z | 490 | (M + H) + |
| 7-652; | A-18; | C-07; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 7-653; | A-18; | C-08; | MS m/z | 508 | (M + H)+ |
| 7-654; | A-18; | C-09; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-655; | A-18; | C-10; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-656; | A-18; | C-11; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-657; | A-18; | C-12; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-658; | A-18; | C-13; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 7-659; | A-18; | C-14; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-660; | A-18; | C-15; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-661; | A-18; | C-16; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 7-662; | A-18; | C-17; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-663; | A-18; | C-18; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-664; | A-18; | C-19; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-665; | A-18; | C-20; | MS m/z | 573 | $(M + H)^+$ |
| 7-666; | A-18; | C-21; | MS m/z | 495 | (M + H)+ |

| 7-667; | A-18; | C-22; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-668; | A-18; | C-23; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-669; | A-18; | C-24; | MS m/z | 556 | (M + H)+ |
| 7-670; | A-18; | C-25; | MS m/z | 481 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-671; | A-18; | C-26; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-672; | A-18; | C-27; | MS m/z | 501 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-673; | A-18; | C-28; | MS m/z | 604 | $(M + H)^+$ |
| 7-674; | A-18; | C-29; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-675; | A-18; | C-30; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-676; | A-18; | C-31; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-677; | A-18; | C-32; | MS m/z | 549 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-678; | A-18; | C-33; | MS m/z | 561 | (M + H)+ |
| 7-679; | A-18; | C-34; | MS m/z | 569 | $(M + H)^+$ |
| 7-680; | A-18; | C-35; | MS m/z | 578 | $(M + H)^+$ |
| 7-681; | A-18; | C-36; | MS m/z | 573 | $(M + H)^+$ |
| 7-682; | A-19; | C-01; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-683; | A-19; | C-02; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-684; | A-19; | C-03; | MS m/z | 452 | (M + H) + |
| 7-685; | A-19; | C-04; | MS m/z | 456 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-686; | A-19; | C-05; | MS m/z | 458 | (M + H)+ |
| 7-687; | A-19; | C-06; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-688; | A-19; | C-07; | MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 7-689; | A-19; | C-08; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-690; | A-19; | C-09; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-691; | A-19; | C-10; | MS m/z | 496 | (M + H)+ |
| 7-692; | A-19; | C-11; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 7-693; | A-19; | C-12; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 7-694; | A-19; | C-13; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-695; | A-19; | C-14; | MS m/z | 526 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 7-696; 7-697; 7-698; 7-699; 7-700; 7-701; 7-702; 7-703; 7-706; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; 7-715; | A-19; | C-15; C-16; C-17; C-18; C-19; C-20; C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-26; C-27; C-28; C-29; | MS m/z | 544 536 544 456 508 549 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H |
|---|---|---|--|---|--|
| 7-698; 7-699; 7-700; 7-701; 7-702; 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; | C-17; C-18; C-19; C-20; C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z | 544 456 508 549 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-699; 7-700; 7-701; 7-702; 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; | C-18; C-19; C-20; C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-26; C-27; | MS m/z | 456 508 549 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-700; 7-701; 7-702; 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; | C-19; C-20; C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z | 508 549 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-701; 7-702; 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-20; C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-26; C-27; | MS m/z | 549 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-702; 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-21; C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z | 471 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-703; 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-22; C-23; C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z | 497 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + |
| 7-704; 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-23; C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z | 511 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + (M + H) + (M + H) + (M + H) + |
| 7-705; 7-706; 7-707; 7-708; 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-24; C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z | 532 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + (M + H) + (M + H) + |
| 7-706; 7-707; 7-708; 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; A-19; | C-25; C-26; C-27; C-28; | MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z | 457 469 477 580 | (M + H) + (M + H) + (M + H) + |
| 7-707; 7-708; 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; A-19; | C-26; C-27; C-28; | MS m/z MS m/z MS m/z | 469 477 580 | $(M + H)^+$ $(M + H)^+$ |
| 7-708; 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; A-19; | C-27; C-28; | MS m/z | 477 580 | $(M + H)^+$ |
| 7-709; 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; A-19; | C-28; | MS m/z | 580 | (M + H)+ |
| 7-710; 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; | • | | | |
| 7-711; 7-712; 7-713; 7-714; | _ | C-29; | MS m/z | 483 | (M + n) |
| 7-712; 7-713; 7-714; | A-19; | | | | (M T II) |
| 7-713; 7-714; | | C-30; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-714; | A-19; | C-31; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| | A-19; | C-32; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-715 · | A-19; | C-33; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| , | A-19; | C-34; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 7-716; | A-19; | C-35; | .MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 7-717; | A-19; | C-36; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 7-718; | A-20; | C-01; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-719; | A-20; | C-02; | MS m/z | 444 | (M + H) + |
| 7-720; | A-20; | C-03; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 7-721; | A-20; | C-04; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 7-722; | A-20; | C-05; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-723; | A-20 · | C-06; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-724; | 11 4U, | | | | |
| 7-722; 7-723; | A-20 ; | C-05; | MS m/z | 462 | (M + H |

| 7-725; | A-20; | C-08; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|--------|--------|-----|----------------------|
| 7-726; | A-20; | C-09; | MS m/z | 494 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-727; | A-20; | C-10; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-728; | A-20 ; | C-11; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-729; | A-20; | C-12; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-730; | A-20; | C-13; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-731; | A-20; | C-14; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| 7-732; | A-20; | C-15; | MS m/z | 548 | (M + H)+ |
| 7-733; | A-20; | C-16; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-734; | A-20; | C-17; | MS m/z | 548 | $(M + H)^+$ |
| 7-735; | A-20; | C-18; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 7-736; | A-20; | C-19; | MS m/z | 512 | $(M + H)^+$ |
| 7-737; | A-20; | C-20; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 7-738; | A-20; | C-21; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-739; | A-20; | C-22; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-740; | A-20; | C-23; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 7-741; | A-20; | C-24; | MS m/z | 536 | $(M + H)^+$ |
| 7-742; | A-20; | C-25·; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 7-743; | A-20 ; | C-26; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 7-744; | A-20; | C-27; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-745; | A-20; | C-28; | MS m/z | 584 | $(M + H)^+$ |
| 7-746; | A-20; | C-29; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-747; | A-20; | C-30; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-748; | A-20; | C-31; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-749; | A-20; | C-32; | MS m/z | 529 | (M + H) + |
| 7-750; | A-20; | C-33; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 7-751; | A-20; | C-34; | MS m/z | 549 | (M + H) ⁺ |
| 7-752; | A-20; | C-35; | MS m/z | 558 | (M + H)+ |
| 7-753; | A-20; | C-36; | MS m/z | 553 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 7-754; | A-21; | C-01; | MS m/z | 438 | (M + H) ⁺ |
|--------|-------|-------|---------|-----|----------------------|
| 7-755; | A-21; | C-02; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 7-756; | A-21; | C-03; | .MS m/z | 462 | (M + H) + |
| 7-757; | A-21; | C-04; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-758; | A-21; | C-05; | MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 7-759; | A-21; | C-06; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-760; | A-21; | C-07; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-761; | A-21; | C-08; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-762; | A-21; | C-09; | MS m/z | 500 | (M + H)+ |
| 7-763; | A-21; | C-10; | MS m/z | 506 | (M + H)+ |
| 7-764; | A-21; | C-11; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-765; | A-21; | C-12; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-766; | A-21; | C-13; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| 7-767; | A-21; | C-14; | MS m/z | 536 | $(M + H)^+$ |
| 7-768; | A-21; | C-15; | MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 7-769; | A-21; | C-16; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 7-770; | A-21; | C-17; | MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 7-771; | A-21; | C-18; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-772; | A-21; | C-19; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-773; | A-21; | C-20; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 7-774; | A-21; | C-21; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-775; | A-21; | C-22; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-776; | A-21; | C-23; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-777; | A-21; | C-24; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-778; | A-21; | C-25; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-779; | A-21; | C-26; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-780; | A-21; | C-27; | MS m/z | 487 | (M + H)+ |
| 7-781; | A-21; | C-28; | MS m/z | 590 | (M + H)+ |
| 7-782; | A-21; | C-29; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-783; | A-21; | C-30; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|--------------|---------------|
| 7-784; | A-21; | C-31; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 7-785; | A-21; | C-32; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-786; | A-21; | C-33; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 7-787; | A-21; | C-34; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 7-788; | A-21; | C-35; | MS m/z | 564 | (M + H)+ |
| 7-789; | A-21; | C-36; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 7-790; | A-22; | C-01; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-791; | A-22; | C-02; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-792; | A-22; | C-03; | MS m/z | 486 | (W + H); |
| 7-793; | A-22; | C-04; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-794; | A-22; | C-05; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-795; | A-22; | C-06; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-796; | A-22; | C-07; | MS m/z | 502 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-797; | A-22; | C-08; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-798; | A-22; | C-09; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-799; | A-22; | C-10; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| 7-800; | A-22; | C-11; | MS m/z | 538 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-801; | A-22; | C-12; | MS m/z | 544 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-802; | A-22; | C-13; | MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 7-803; | A-22; | C-14; | MS m/z | 560 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-804; | A-22; | C-15; | MS m/z | 578 | $(M + H)^+$ |
| 7-805; | A-22; | C-16; | MS m/z | 570 | $(M + H)^+$ |
| 7-806; | A-22; | C-17; | MS m/z | 578 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-807; | A-22; | C-18; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-808; | A-22; | C-19; | MS m/z | 542 . | $(M + H)^+$ |
| 7-809; | A-22; | C-20; | MS m/z | 583 | $(M + H)^+$ |
| 7-810; | A-22; | C-21; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-811; | A-22; | C-22; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |

| 7-812; | A-22; | C-23; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
|--------|---------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-813; | A-22; | C-24; | MS m/z | 566 | (M + H) + |
| 7-814; | A-22; | C-25; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-815; | A-22; | C-26; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-816; | A-22; | C-27; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 7-817; | A-22; | C-28; | MS m/z | 614 | $(M + H)^+$ |
| 7-818; | A-22; | C-29; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-819; | A-22; | C-30; | MS m/z | 533 | (M + H)+ |
| 7-820; | A-22; | C-31; | MS m/z | 533 | (M + H) ⁺ |
| 7-821; | - A-22; | C-32; | MS m/z | 559 | $(M + H)^+$ |
| 7-822; | A-22; | C-33; | MS m/z | 571 | $(M + H)^+$ |
| 7-823; | A-22; | C-34; | MS m/z | 579 | $(M + H)^+$ |
| 7-824; | A-22; | C-35; | MS m/z | 588 | $(M + H)^+$ |
| 7-825; | A-22; | C-36; | MS m/z | 583 | $(M + H)^+$ |
| 7-826; | A-23; | C-01; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-827; | A-23; | C-02; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-828; | A-23; | C-03; | MS m/z | 490 | (M + H)+ |
| 7-829; | A-23; | C-04; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 7-830; | A-23; | C-05; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 7-831; | A-23; | C-06; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 7-832; | A-23; | C-07; | MS m/z | 506 | (M + H)+ |
| 7-833; | A-23; | C-08; | MS m/z | 522 | (M + H)+ |
| 7-834; | A-23; | C-09; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-835; | A-23; | C-10; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-836; | A-23; | C-11; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-837; | A-23; | C-12; | MS m/z | 548 | $(M + H)^+$ |
| 7-838; | A-23; | C-13; | MS m/z | 558 | $(M + H)^+$ |
| 7-839; | A-23; | C-14; | MS m/z | 564 | (M + H)+ |
| 7-840; | A-23; | C-15; | MS m/z | 582 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| | | | | | • |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-841; | A-23; | C-16; | MS m/z | 574 | $(M + H)^+$ |
| 7-842; | A-23; | C-17; | MS m/z | 582 | $(M + H)^+$ |
| 7-843; | A-23; | C-18; | MS m/z | 494 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-844; | A-23; | C-19; | MS m/z | 546 | (M + H)+ |
| 7-845; | A-23; | C-20; | MS m/z | 587 | (M + H)+ |
| 7-846; | A-23; | C-21; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 7-847; | A-23; | C-22; | MS m/z | 535 | (M + H)+ |
| 7-848; | A-23; | C-23; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 7-849; | A-23; | C-24; | MS m/z | 570 | (M + H)+ |
| 7-850; | A-23; | C-25; | MS m/z | 495 | (M + H)+ |
| 7-851; | A-23; | C-26; | MS m/z | 507 | (M + H)+ |
| 7-852; | A-23; | C-27; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 7-853; | A-23; | C-28; | MS m/z | 618 | (M + H)+ |
| 7-854; | A-23; | C-29; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-855; | A-23; | C-30; | MS m/z | 537 | (M + H)+ |
| 7-856; | A-23; | C-31; | MS m/z | 537 | $(M + H)^+$ |
| 7-857; | A-23; | C-32; | MS m/z | 563 | (M + H)+ |
| 7-858; | A-23; | C-33; | MS m/z | 575 | $(M + H)^+$ |
| 7-859; | A-23; | C-34; | MS m/z | 583 | (M + H) ⁺ |
| 7-860; | A-23; | C-35; | MS m/z | 592 | (M + H)+ |
| 7-861; | A-23; | C-36; | MS m/z | 587 | (M + H)+ |
| 7-862; | A-24; | C-01; | MS m/z | 470 | (M + H)+ |
| 7-863; | A-24; | C-02; | MS m/z | 482 | (M + H)+ |
| 7-864; | A-24; | C-03; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-865; | A-24; | C-04; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-866; | A-24; | C-05; | MS m/z | 500 | (M + H) ⁺ |
| 7-867; | A-24; | C-06; | MS m/z | 508 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-868; | A-24; | C-07; | MS m/z | 510 | (M + H)+ |
| 7-869; | A-24; | C-08; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |

7-895;

7-896;

7-897;

7-898;

A-24;

A-24;

A-24;

C-34;

C-35;

C-36;

A-25; C-01;

| 7-870; | A-24; | C-09; | MS m/z | 532 | (M + H) ⁺ |
|--------|--|---|---|---|---|
| 7-871; | A-24; | C-10; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 7-872; | A-24; | C-11; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 7-873; | A-24; | C-12; | MS m/z | 552 | $(M + H)^+$ |
| 7-874; | A-24; | C-13; | MS m/z | 562 | (M + H)+ |
| 7-875; | A-24; | C-14; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-876; | A-24; | C-15; | MS m/z | 586 | $(M + H)^+$ |
| 7-877; | A-24; | C-16; | MS m/z | 578 | $(M + H)^+$ |
| 7-878; | A-24; | C-17; | MS m/z | 586 | $(M + H)^+$ |
| 7-879; | A-24; | C-18; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-880; | A-24; | C-19; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-881; | A-24; | C-20; | MS m/z | 591 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-882; | A-24; | C-21; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-883; | A-24; | C-22; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 7-884; | A-24; | C-23; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 7-885; | A-24; | C-24; | MS m/z | 574 | $(M + H)^*$ |
| 7-886; | A-24; | C-25; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-887; | A-24; | C-26; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 7-888; | A-24; | C-27; | MS m/z | 519 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-889; | A-24; | C-28; | MS m/z | 622 | $(M + H)^+$ |
| 7-890; | A-24; | C-29; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-891; | A-24; | C-30; | MS m/z | 541 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-892; | A-24; | C-31; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 7-893; | A-24; | C-32; | MS m/z | 567 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-894; | A-24; | C-33; | MS m/z | 579 | $(M + H)^+$ |
| | 7-871; 7-872; 7-873; 7-874; 7-875; 7-876; 7-877; 7-878; 7-880; 7-881; 7-882; 7-883; 7-884; 7-885; 7-886; 7-887; 7-889; 7-890; 7-891; 7-892; 7-893; | 7-871; A-24; 7-872; A-24; 7-873; A-24; 7-874; A-24; 7-875; A-24; 7-876; A-24; 7-877; A-24; 7-879; A-24; 7-880; A-24; 7-881; A-24; 7-882; A-24; 7-883; A-24; 7-884; A-24; 7-885; A-24; 7-886; A-24; 7-887; A-24; 7-887; A-24; 7-887; A-24; 7-889; A-24; 7-890; A-24; 7-890; A-24; 7-891; A-24; 7-892; A-24; 7-893; A-24; | 7-871; A-24; C-10; 7-872; A-24; C-11; 7-873; A-24; C-12; 7-874; A-24; C-13; 7-875; A-24; C-14; 7-876; A-24; C-15; 7-877; A-24; C-16; 7-878; A-24; C-16; 7-879; A-24; C-18; 7-880; A-24; C-19; 7-881; A-24; C-20; 7-882; A-24; C-21; 7-883; A-24; C-22; 7-884; A-24; C-23; 7-886; A-24; C-24; 7-886; A-24; C-25; 7-887; A-24; C-26; 7-889; A-24; C-26; 7-889; A-24; C-26; 7-889; A-24; C-29; 7-890; A-24; C-29; 7-891; A-24; C-30; 7-892; A-24; C-31; 7-893; A-24; C-32; | 7-871; A-24; C-10; MS m/z 7-872; A-24; C-11; MS m/z 7-873; A-24; C-12; MS m/z 7-874; A-24; C-13; MS m/z 7-875; A-24; C-14; MS m/z 7-876; A-24; C-15; MS m/z 7-877; A-24; C-16; MS m/z 7-878; A-24; C-16; MS m/z 7-879; A-24; C-17; MS m/z 7-880; A-24; C-19; MS m/z 7-881; A-24; C-19; MS m/z 7-882; A-24; C-20; MS m/z 7-883; A-24; C-21; MS m/z 7-884; A-24; C-22; MS m/z 7-885; A-24; C-23; MS m/z 7-886; A-24; C-25; MS m/z 7-887; A-24; C-26; MS m/z 7-889; A-24; C-26; MS m/z 7-889; A-24; C-28; MS m/z 7-890; A-24; C-29; MS m/z 7-891; A-24; C-29; MS m/z 7-892; A-24; C-30; MS m/z 7-893; A-24; C-30; MS m/z 7-892; A-24; C-31; MS m/z 7-893; A-24; C-30; MS m/z 7-893; A-24; C-31; MS m/z 7-893; A-24; C-31; MS m/z | 7-871; A-24; C-10; MS m/z 538 7-872; A-24; C-11; MS m/z 546 7-873; A-24; C-12; MS m/z 552 7-874; A-24; C-13; MS m/z 562 7-875; A-24; C-14; MS m/z 568 7-876; A-24; C-15; MS m/z 586 7-877; A-24; C-16; MS m/z 578 7-878; A-24; C-17; MS m/z 586 7-879; A-24; C-18; MS m/z 586 7-879; A-24; C-18; MS m/z 586 7-880; A-24; C-19; MS m/z 550 7-881; A-24; C-20; MS m/z 591 7-882; A-24; C-21; MS m/z 539 7-883; A-24; C-22; MS m/z 539 7-884; A-24; C-23; MS m/z 553 7-885; A-24; C-24; MS m/z 574 7-886; A-24; C-25; MS m/z 571 7-887; A-24; C-26; MS m/z 511 7-888; A-24; C-26; MS m/z 519 |

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

587

596

591

MS m/z

MS m/z

MS m/z

MS m/z

| 7-899; | A-25; | C-02; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-900; | A-25; | C-03; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| 7-901; | A-25; | C-04; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 7-902; | A-25; | C-05; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 7-903; | A-25; | C-06; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 7-904; | A-25; | C-07; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-905; | A-25; | C-08; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-906; | A-25; | C-09; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 7-907; | A-25; | C-10; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-908; | A-25; | C-11; | MS m/z | 473 | (M + H)+ · |
| 7-909; | A-25; | C-12; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-910; | A-25; | C-13; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-911; | A-25; | C-14; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-912; | A-25; | C-15; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-913; | A-25; | C-16; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-914; | A-25; | C-17; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-915; | A-25; | C-18; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-916; | A-25; | C-19; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 7-917; | A-25; | C-20; | MS m/z | 518 | (M + H) ⁺ |
| 7-918; | A-25; | C-21; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-919; | A-25; | C-22; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-920; | A-25; | C-23; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-921; | A-25; | C-24; | MS m/z | 501 | (M + H)+ |
| 7-922; | A-25; | C-25; | MS m/z | 426 | (M + H) + |
| 7-923; | A-25; | C-26; | MS m/z | 438 | (M + H) ⁺ |
| 7-924; | A-25; | C-27; | MS m/z | 446 | (M + H) ⁺ |
| 7-925; | A-25; | C-28; | MS m/z | 549 | (M + H)+ |
| 7-926; | A-25; | C-29; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 7-927; | A-25; | C-30; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-928; | A-25; | C-31; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|----------|-------|---------------|
| 7-929; | A-25; | C-32; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-930; | A-25; | C-33; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 7-931; | A-25; | C-34; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-932; | A-25; | C-35; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-933; | A-25; | C-36; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-934; | A-27; | C-01; | MS m/z | 437 . | $(M + H)^+$ |
| 7-935; | A-27; | C-02; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-936; | A-27; | C-03; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 7-937; | A-27; | C-04; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 7-938; | A-27; | C-05; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-939; | A-27; | C-06; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-940; | A-27; | C-07; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-941; | A-27; | C-08; | MS m/z | 493 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-942; | A-27; | C-09; | MS m/z | 499 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-943; | A-27; | C-10; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-944; | A-27; | C-11; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-945; | A-27; | C-12; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-946; | A-27; | C-13; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-947; | A-27; | C-14; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-948; | A-27; | C-15; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 7-949; | A-27; | C-16; | MS m/z | 545 | $(M + H)^+$ |
| 7-950; | A-27; | C-17; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 7-951; | A-27; | C-18; | MS m/z · | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-952; | A-27; | C-19; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-953.; | A-27; | C-20; | MS m/z | 558 | $(M + H)^+$ |
| 7-954; | A-27; | C-21; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-955; | A-27; | C-22; | MS m/z | 506 | (M + H) + |
| 7-956; | A-27; | C-23; | MS m/z | 520 | (M + H) + |
| | | | | | |

| | | | | , | |
|--------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-957; | A-27; | C-24; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 7-958; | A-27; | C-25; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-959; | A-27; | C-26; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-960; | A-27; | C-27; | MS m/z | 486 | (M + H)* |
| 7-961; | A-27; | C-28; | MS m/z | 589 | $(M + H)^+$ |
| 7-962; | A-27; | C-29; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-963; | A-27; | C-30; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-964; | A-27; | C-31; | MS m/z | 508 | (M + H) + |
| 7-965; | A-27; | C-32; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-966; | A-27:; | C-33; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 7-967; | A-27; | C-34; | MS m/z | 554 | $(M + H)^+$ |
| 7-968; | A-27; | C-35; | MS m/z | 563 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-969; | A-27; | C-36; | MS m/z | 558 | $(M + H)^+$ |
| 7-970; | A-28; | C-01; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-971; | A-28; | C-02; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-972; | A-28; | C-03; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-973; | A-28; | C-04; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-974; | A-28; | C-05; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 7-975; | A-28; | C-06; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-976; | A-28; | C-07; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-977; | A-28; | C-08; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-978; | A-28; | C-09; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-979; | A-28; | C-10; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-980; | A-28; | C-11; | MS m/z | 543 | (M + H)* |
| 7-981; | A-28; | C-12; | MS m/z | 549 | $(M + H)^+$ |
| 7-982; | A-28; | C-13; | MS m/z | 559 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-983; | A-28; | C-14; | MS m/z | 565 | $(M + H)^+$ |
| 7-984; | A-28; | C-15; | MS m/z | 583 | $(M + H)^+$ |
| 7-985; | A-28; | C-16; | MS m/z | 575 | $(M + H)^{+}$ |

| H) + H) + H) + H) + H) + H) + H) + |
|--|
| H) + H) + H) + H) + H) + |
| H) + H) + H) + H) + |
| H) + H) + H) + |
| H) + H) + H) + |
| H) + |
| H) + |
| |
| |
| H) + |
| H) ^{,+} |
| H) + |
| H)+ |
| > 4 |
| H)+ |
| · н)+ |
| |
| H)+ |
| H)+ |
| H)+ H)+ |
| H)+ H)+ H)+ |
| |

| 7-1015; | A-33; | C-10; | MS m/z | 434 | $(M + H)^{+}$ |
|---------|--------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-1016; | A-33; | C-11; | MS m/z | 442 | (M + H)+ |
| 7-1017; | A-33; | C-12; | MS m/z | 448 | (M + H)+ |
| 7-1018; | A-33; | C-13; | MS m/z | 458 | (M + H)+ |
| 7-1019; | A-33; | C-14; | MS m/z | 464 | (M + H) + |
| 7-1020; | A-33; | C-15; | MS m/z | 482 | (M + H)+ |
| 7-1021; | A-33 ; | C-16; | MS m/z | 474 | (M + H) ⁺ |
| 7-1022; | A-33; | C-17; | MS m/z | 482 | (M + H) ⁺ |
| 7-1023; | A-33; | C-18; | MS m/z | 394 | (M + H)+ |
| 7-1024; | A-33 ; | C-19; | MS m/z | 446 | (M + H)+ |
| 7-1025; | A-33; | C-20; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1026; | A-33; | C-21; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 7-1027; | A-33; | C-22; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 7-1028; | A-33; | C-23; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 7-1029; | A-33; | C-24; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-1030; | A-33; | C-25; | MS m/z | 395 | $(M + H)^+$ |
| 7-1031; | A-33; | C-26; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 7-1032; | A-33; | C-27; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 7-1033; | A-33; | C-28; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 7-1034; | A-33; | C-29; | MS m/z | 421 | (M + H)+ |
| 7-1035; | A-33; | C-30; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1036; | A-33; | C-31; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 7-1037; | A-33; | C-32; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-1038; | A-33; | C-33; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-1039; | A-33; | C-34; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 7-1040; | A-33; | C-35; | MS m/z | 492 | (M + H)+ |
| 7-1041; | A-33; | C-36; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1042; | A-34; | C-01; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 7-1043; | A-34; | C-02; | MS m/z | 391 | (M + H)+ |

| 7-1044; | A-34; | C-03; | MS m/z | 403 | $(M + H)^+$ |
|-----------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1045; | A-34; | C-04; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| 7-1046; | A-34; | C-05; | MS m/z | 409 | $(M + H)^+$ |
| 7-1047; | A-34; | C-06; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 7-1048; | A-34; | C-07; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 7-1049; | A-34; | C-08; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 7-1050; | A-34; | C-09; | MS m/z | 441 | (M + H)+ |
| 7-1051; | A-34; | C-10; | MS m/z | 447 | (M + H) + |
| 7-1052; | A-34; | C-11; | MS m/z | 455 | $(M + H)^+$ |
| 7-1053; | A-34; | C-12; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 7-1054; | A-34; | C-13; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 7-1055; | A-34; | C-14; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| . 7-1056; | A-34; | C-15; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-1057; | A-34; | C-16; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1058; | A-34; | C-17; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-1059; | A-34; | C-18; | MS m/z | 407 | (M + H) + |
| 7-1060; | A-34; | C-19; | MS m/z | 459 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1061; | A-34; | C-20; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-1062; | A-34; | C-21; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-1063; | A-34; | C-22; | MS m/z | 448 | (M + H) |
| 7-1064; | A-34; | C-23; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-1065; | A-34; | C-24; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 7-1066; | A-34; | C-25; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-1067; | A-34; | C-26; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-1068; | A-34; | C-27; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 7-1069; | A-34; | C-28; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |

7-1070; A-34; C-29; MS m/z

A-34; C-30;

A-34; C-31; MS m/z

7-1071;

7-1072;

434

450

450

MS m/z

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

 $(M + H)^+$

| 7-1073; | A-34; | C-32; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
|---------|----------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-1074; | A-34; | C-33; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-1075; | A-34; | C-34; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 7-1076; | 'A-34; | C-35; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 7-1077; | A-34; | C-36; | MS m/z | 500 | (M + H)+ |
| 7-1078; | A-35; | C-01; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-1079; | A-35; | C-02; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| 7-1080; | A-35; | C-03; | MS m/z | 418 | $(M + H)^+$ |
| 7-1081; | A-35; | C-04; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-1082; | · A-35 ; | C-05; | MS m/z | 424 | (M + H)+ · |
| 7-1083; | A-35; | C-06; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-1084; | A-35; | C-07; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 7-1085; | A-35; | C-08; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 7-1086; | A-35; | C-09; | MS m/z | 456 | (M + H) ⁺ |
| 7-1087; | A-35; | C-10; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-1088; | A-35; | C-11; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-1089; | A-35; | C-12; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-1090; | A-35; | C-13; | MS m/z | 486 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-1091; | A-35; | C-14; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-1092; | A-35; | C-15; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 7-1093; | A-35; | C-16; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 7-1094; | A-35; | C-17; | MS m/z | 510 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1095; | A-35; | C-18; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-1096; | A-35; | C-19; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-1097; | A-35; | C-20; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 7-1098; | A-35; | C-21; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1099; | A-35; | C-22; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-1100; | A-35; | C-23; | MS m/z | 477 | (M + H) |
| 7-1101; | A-35; | C-24; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-1102; | A-35; | C-25; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
|---------|--------|--------|--------|-----|-------------|
| 7-1103; | A-35; | C-26; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 7-1104; | A-35; | C-27; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 7-1105; | A-35; | C-28; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 7-1106; | A-35; | C-29; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-1107; | A-35; | C-30; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1108; | A-35; | C-31; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1109; | A-35; | C-32; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-1110; | A-35; | C-33; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1111; | A-35 ; | ·C-34; | MS m/z | 511 | $(M + H)^+$ |
| 7-1112; | A-35; | C-35; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-1113; | A-35; | C-36; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 7-1114; | A-36; | C-01; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-1115; | A-36; | C-02; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-1116; | A-36; | C-03; | MS m/z | 432 | $(M + H)^+$ |
| 7-1117; | A-36; | C-04; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 7-1118; | A-36; | C-05; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 7-1119; | A-36; | C-06; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-1120; | A-36; | C-07; | MS m/z | 448 | (M + H)+ |
| 7-1121; | A-36; | C-08; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-1122; | A-36; | C-09; | MS m/z | 470 | (M + H)+ |
| 7-1123; | A-36; | C-10; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 7-1124; | A-36; | C-11; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-1125; | A-36; | C-12; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-1126; | A-36; | C-13; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 7-1127; | A-36; | C-14; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 7-1128; | A-36; | C-15; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-1129; | A-36; | C-16; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-1130; | A-36; | C-17; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |

| 7-1131 ; | A-36; | C-18; | MS m/z | 436 | (M + H).+ |
|----------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1132; | A-36; | C-19; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-1133; | A-36; | C-20; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-1134; | A-36; | C-21; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1135; | A-36; | C-22; | MS m/z | 477 | (M + H)+ |
| 7-1136; | A-36; | C-23; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 7-1137; | A-36; | C-24; | MS m/z | 512 | (M + H)+ |
| 7-1138; | A-36; | C-25; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 7-1139; | A-36; | C-26; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 7-1140; | A-36; | C-27; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 7-1141; | A-36; | C-28; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 7-1142; | A-36; | C-29; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 7-1143; | A-36; | C-30; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-1144; | A-36; | C-31; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-1145; | A-36; | C-32; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1146; | A-36; | C-33; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1147; | A-36; | C-34; | MS m/z | 525 | $(M + H)^+$ |
| 7-1148; | A-36; | C-35; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-1149; | A-36; | C-36; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-1150; | A-37; | C-01; | MS m/z | 458 | $(M + H)_+$ |
| 7-1151; | A-37; | C-02; | MS m/z | 470 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-1152; | A-37; | C-03; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| 7-1153; | A-37; | C-04; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-1154; | A-37; | C-05; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 7-1155; | A-37; | C-06; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 7-1156; | A-37; | C-07; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-1157; | A-37; | C-08; | MS m/z | 514 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1158; | A-37; | C-09; | MS m/z | 520 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1159; | A-37; | C-10; | MS m/z | 526 | $(M + H)_+$ |
| | | | | | |

| 7-1160; | A-37; | C-11; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
|----------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-1161; | A-37; | C-12; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-1162; | A-37; | C-13; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-1163; | A-37; | C-14; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 7-1164; | A-37; | C-15; | MS m/z | 574 | $(M + H)^+$ |
| 7-1165; | A-37; | C-16; | MS m/z | 566 | $(M + H)^+$ |
| 7-1166; | A-37; | C-17; | MS m/z | 574 | $(M + H)^+$ |
| 7-1167; | A-37; | C-18; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-1168; | A-37; | C-19; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 7-1169; | A-37; | C-20; | MS m/z | 579 | (M + H)+· |
| 7-1170; | A-37; | C-21; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1171; | A-37; | C-22; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 7-1172; | A-37; | C-23; | MS m/z | 541 | $(M + H)^+$ |
| 7-1173; | A-37; | C-24; | MS m/z | 562 | $(M + H)^+$ |
| 7-1174; | A-37; | C-25; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1175; | A-37; | C-26; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-1176; | A-37; | C-27; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1177; | A-37; | C-28; | MS m/z | 610 | $(M + H)^+$ |
| 7-1178; | A-37; | C-29; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-1179; | A-37; | C-30; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-1180; | A-37; | C-31; | MS m/z | 529 | (M + H)+ |
| 7-1181; | A-37; | C-32; | MS m/z | 555 | (M + H) ⁺ |
| 7-1182; | A-37; | C-33; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 7-1183; | A-37; | C-34; | MS m/z | 575 | (M + H) ⁺ |
| 7-1:184; | A-37; | C-35; | MS m/z | 584 | (M + H)+ |
| 7-1185; | A-37; | C-36; | MS m/z | 579 | $(M + H)^+$ |
| 7-1186; | A-40; | C-01; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 7-1187; | A-40; | C-02; | MS m/z | 435 | (M + H)+ |
| 7-1188; | A-40; | C-03; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-1189; | A-40; | C-04; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1190; | A-40; | C-05; | MS m/z | 453 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1191; | A-40; | C-06; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| 7-1192; | A-40; | C-07; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-1193; | A-40; | C-08; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-1194; | A-40; | C-09; | MS m/z | 485 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1195; | A-40; | C-10; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-1196; | A-40; | C-11; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-1197; | A-40; | C-12; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1198; | A-40; | C-13; | MS m/z | 515 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1199; | A-40; | C-14; | MS m/z | 521 | (M + H)+ |
| 7-1200; | A-40; | C-15; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 7-1201; | A-40; | C-16; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 7-1202; | A-40; | C-17; | MS m/z | 539 | $(M + H)^+$ |
| 7-1203; | A-40; | C-18; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1204; | A-40; | C-19; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1205; | A-40; | C-20; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 7-1206; | A-40; | C-21; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-1207; | A-40; | C-22; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-1208; | A-40; | C-23; | MS m/z | 506 | (M + H)+ |
| 7-1209; | A-40; | C-24; | MS m/z | 527 | $(M + H)^+$ |
| 7-1210; | A-40; | C-25; | MS m/z | 452 | $(M + H)_+$ |
| 7-1211; | A-40; | C-26; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-1212; | A-40; | C-27; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 7-1213; | A-40; | C-28; | MS m/z | 575 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-1214; | A-40; | C-29; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-1215; | A-40; | C-30; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-1216; | A-40; | C-31; | MS m/z | 494 | $(M + H)_{+}$ |
| 7-1217; | A-40; | C-32; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |

| 7-1218; | A-40 ; | C-33; | MS m/z | 532 | (M + H) ⁺ |
|---------|--------|-------|--------|----------------|----------------------|
| 7-1219; | A-40 ; | C-34; | MS m/z | 540 | $(M + H)^+$ |
| 7-1220; | A-40 ; | C-35; | MS m/z | 5 4 9 · | (M + H)+ |
| 7-1221; | A-40 ; | C-36; | MS m/z | 544 | (M + H) ⁺ |
| 7-1222; | A-41 ; | C-32; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-1223; | A-41; | C-37; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-1224; | A-41 ; | C-38; | MS m/z | 480 | (M + H) ⁺ |
| 7-1225; | A-41; | C-39; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1226; | A-41; | C-40; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 7-1227; | A-41; | C-41; | MS m/z | 467 | $(M + \cdot H)^+$ |
| 7-1228; | A-41; | C-42; | MS m/z | 451 | (M + H)+ |
| 7-1229; | A-41; | C-43; | MS m/z | 451 | (M + H) ⁺ |
| 7-1230; | A-41; | C-44; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 7-1231; | A-41; | C-45; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1232; | A-41; | C-46; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-1233; | A-41; | C-47; | MS m/z | 440 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1234; | A-42; | C-01; | MS m/z | 382 | $(M + H)^+$ |
| 7-1235; | A-42; | C-02; | MS m/z | 394 | $(M + H)^+$ |
| 7-1236; | A-42; | C-03; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| 7-1237; | A-42; | C-04; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 7-1238; | A-42; | C-05; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 7-1239; | A-42; | C-06; | MS m/z | 420 | $(M + H)^+$ |
| 7-1240; | A-42; | C-07; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 7-1241; | A-42; | C-08; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 7-1242; | A-42; | C-09; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-1243; | A-42; | C-10; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 7-1244; | A-42; | C-11; | MS m/z | 458 | (M + H)* |
| 7-1245; | A-42; | C-12; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-1246; | A-42; | C-13; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |

| 7-1247; | A-42; | C-14; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
|----------|--------|--------|--------|-------|---------------|
| 7-1248; | A-42; | C-15; | MS m/z | 498 | (M + H) + |
| 7-1249; | A-42; | C-16; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-1250; | A-42; | C-17; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-1251; | A-42; | C-18; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 7-1252; | A-42 ; | C-19; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-1253; | A-42; | C-20; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1254; | A-42; | C-21; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-1255; | A-42; | C-22; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1256; | A-42; | ·C-23; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1257; | A-42; | C-24; | MS m/z | 486 | (M + H).+ |
| 7-1258; | A-42; | C-25; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 7-1259; | A-42; | C-26; | MS m/z | 423 | $(M + H)^+$ |
| 7-1260; | A-42; | C-27; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 7-1261; | A-42; | C-28; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-1262; | A-42; | C-29; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1263; | A-42; | C-30; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1264; | A-42; | C-31; | MS m/z | 453 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1265; | A-42; | C-32; | MS m/z | 479 · | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1266; | A-42; | C-33; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-1267; | A-42; | C-34; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 7-1268; | A-42; | C-35; | MS m/z | 508 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1269; | A-42; | C-36; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1270; | A-42; | C-37; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-1271; | A-42; | C-38; | MS m/z | 480 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1272 ; | A-42; | C-39; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1273; | A-42; | C-40; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1274; | A-42; | C-41; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 7-1275; | A-42; | C-42; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |

| 7-1276; | A-42; | C-43; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
|---------|----------|-------|--------|------------------|----------------------|
| 7-1277; | A-42; | C-44; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 7-1278; | A-42; | C-45; | MS m/z | 451 | (M + H) + |
| 7-1279; | A-42; | C-46; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-1280; | A-42; | C-47; | MS m/z | 440 | (M + H) ⁺ |
| 7-1281; | A-43; | C-32; | MS m/z | 465 | (M + H) + |
| 7-1282; | A-43; | C-37; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1283; | A-43; | C-38; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 7-1284; | A-43; | C-39; | MS m/z | 439 | (M + H) ⁺ |
| 7-1285; | ···A-43; | C-40; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1286; | A-43; | C-41; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1287; | A-43; | C-42; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1288; | A-43; | C-43; | MS m/z | 437 | $(M + H)^+$ |
| 7-1289; | A-43; | C-44; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |
| 7-1290; | A-43; | C-45; | MS m/z | 437 | (M + H)+ |
| 7-1291; | A-43; | C-46; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 7-1292; | A-43; | C-47; | MS m/z | 426 | $(M + H)^+$ |
| 7-1293; | A-44; | C-32; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-1294; | A-44; | C-37; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-1295; | A-44; | C-38; | MS m/z | 494 ⁻ | $(M + H)^+$ |
| 7-1296; | A-44; | C-39; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-1297; | A-44; | C-40; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1298; | A-44; | C-41; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-1299; | A-44; | C-42; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1300; | A-44; | C-43; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1301; | A-44; | C-44; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1302; | A-44; | C-45; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1303; | A-44; | C-46; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-1304; | A-44 ; | C-47; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |

| 7-1305; | A-45; | C-32 | | | |
|---------|--------|----------|--------|-----|-------------|
| 7-1306; | A-45; | C-37; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-1307; | A-45; | C-38 | | | |
| 7-1308; | A-45; | C-39; | MS m/z | 453 | $(M + H)^+$ |
| 7-1309; | A-45; | C-40; | MS m/z | 451 | (M + H) + |
| 7-1310; | A-45; | C-41; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
| 7-1311; | A-45; | C-42; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1312; | A-45; | C-43 | | | |
| 7-1313; | A-45; | C-44; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 7-1314; | A-45; | C-45 | | | |
| 7-1315; | A-45; | C-46; | MS m/z | 448 | (M + H)+ |
| 7-1316; | A-45; | C-47; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-1317; | A-46; | C-32; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1318; | A-46; | C-37; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-1319; | A-46; | C-38 | | | |
| 7-1320; | A-46; | C-39; | MS m/z | 463 | (M + H)+ |
| 7-1321; | A-46; | · C-40 ; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 7-1322; | A-46; | C-41; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-1323; | A-46; | C-42; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 7-1324; | A-46; | C-43; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 7-1325; | A-46 ; | C-44; | MS m/z | 449 | (M + H)+ |
| 7-1326; | A-46; | C-45 | | | |
| 7-1327; | A-46; | C-46; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-1328; | A-46; | C-47; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 7-1329; | A-47; | C-32; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 7-1330; | A-47; | C-37; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 7-1331; | A-47; | C-38; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-1332; | A-47; | C-39; | MS m/z | 453 | (M + H)+ |
| | | | | | |

7--1333 ; A--47 ; C--40 ; MS m/z 451 (M + H)^+

| 7-1334; | A-47; | C-41; | MS m/z | 467 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1335; | A-47; | C-42; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1336; | A-47; | C-43; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1337; | A-47; | C-44; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |
| 7-1338; | A-47; | C-45; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 7-1339; | A-47; | C-46; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 7-1340; | A-47; | C-47; | MS m/z | 440 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1341; | A-48; | C-32; | MS m/z | 533 | (M + H)+ |
| 7-1342; | A-48; | C-37; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-1343; | A-48; | C-38; | MS m/z | 534 | (M + H) + |
| 7-1344; | A-48; | C-39; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1345; | A-48; | C-40; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1346; | A-48; | C-41; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-1347; | A-48; | C-42; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1348; | A-48; | C-43; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 7-1349; | A-48; | C-44; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 7-1350; | A-48; | C-45; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1351; | A-48; | C-46; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 7-1352; | A-48; | C-47; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 7-1353; | A-49; | C-32; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 7-1354; | A-49; | C-37; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-1355; | A-49; | C-38; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-1356; | A-49; | C-39; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1357; | A-49; | C-40; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1358; | A-49; | C-41; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-1359; | A-49; | C-42; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1360; | A−49; | C-43; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1361; | A-49; | C-44; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-1362; | A-49; | C-45; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |

| 7-1363; | A-49; | C-46; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1364; | A-49; | C-47; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-1365; | A-50; | C-32; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-1366; | A-50; | C-37; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1367; | A-50; | C-38; | MS m/z | 530 | (M + H) + |
| 7-1368; | A-50; | C-39; | MS m/z | 503 | (M + H)* |
| 7-1369; | A-50; | C-40; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1370; | A-50; | C-41; | MS m/z | 517 | (M + H) + |
| 7-1371; | A-50; | C-42; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1372; | A-50; | C-43; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1373; | A-50; | C-44; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1374; | A-50; | C-45; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1375; | A-50; | C-46; | MS m/z | 498 | (M + H)+ |
| 7-1376; | A-50; | C-47; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-1377; | A-51; | C-32; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 7-1378; | A-51; | C-37; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-1379; | A-51; | C-38 | | | |
| 7-1380; | A-51; | C-39; | MS m/z | 521 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1381; | A-51; | C-40; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-1382; | A-51; | C-41; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 7-1383; | A-51; | C-42; | MS m/z | 519 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1384; | A-51; | C-43; | MS m/z | 519 | $(M + H)^+$ |
| 7-1385; | A-51; | C-44; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1386; | A-51; | C-45; | MS m/z | 519 | (M + H)+ |
| 7-1387; | A-51; | C-46; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 7-1388; | A-51; | C-47; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-1389; | A-52; | C-32; | MS m/z | 535 | (M + H)+ |
| 7-1390; | A-52; | C-37; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-1391; | A-52; | C-38 | | | |

| 7-1392; | A-52; | C-39; | MS m/z | 509 | $(M + H)^{+}$ |
|----------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1393; | A-52; | C-40; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1394; | A-52; | C-41; | MS m/z | 523 | (M + H)+ |
| 7-1395 ; | A-52; | C-42; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1396; | A-52; | C-43; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1397; | A-52; | C-44; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-1398; | A-52; | C-45; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1399; | A-52; | C-46; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 7-1400; | A-52; | C-47; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 7-1401; | A-53; | C-32; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1402; | A-53; | C-37; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1403; | A-53; | C-38 | | | |
| 7-1404; | A-53; | C-39; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 7-1405; | A-53; | C-40; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1406; | A-53; | C-41; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1407; | A-53; | C-42; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1408; | A-53; | C-43; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1409; | A-53; | C-44; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-1410; | A-53; | C-45; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1411; | A-53; | C-46; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-1412; | A-53; | C-47; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-1413; | A-59; | C-01; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 7-1414; | A-59; | C-02; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-1415; | A-59; | C-03; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-1416; | A-59; | C-04; | MS m/z | 462 | $(M + H)^*$ |
| 7-1417; | A-59; | C-05; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 7-1418; | A-59; | C-06; | MS m/z | 472 | (M + H) + |
| 7-1419; | A-59; | C-07; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-1420; | A-59; | C-08; | MS m/z | 490 | $(M + H)^{+}$ |

| 7-1421; | A-59; | C-09; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 7-1422; | A-59; | C-10; | MS m/z | 502 | (M + H)+ |
| 7-1423; | A-59; | C-11; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| 7-1424; | A-59; | C-12; | MS m/z | 516 | (M + H)+ |
| 7-1425; | A-59; | C-13; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 7-1426; | A-59; | C-14; | MS m/z | 532 | (M + H)+ |
| 7-1427; | A-59; | C-15; | MS m/z | 550 | (M + H)* |
| 7-1428; | A-59; | C-16; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-1429; | A-59; | C-17; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-1430; | A-59; | C-18; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 7-1431; | A-59; | C-19; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-1432; | A-59; | C-20; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 7-1433; | A-59; | C-21; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| 7-1434; | A-59; | C-22; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 7-1435; | A-59; | C-23; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1436; | A-59; | C-24; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 7-1437; | A-59; | C-25; | MS m/z | 463 | $(M + H)^+$ |
| 7-1438; | A-59; | C-26; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-1439; | A-59; | C-27; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 7-1440; | A-59; | C-28; | MS m/z | 586 | $(M + H)^+$ |
| 7-1441; | A-59; | C-29; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1442; | A-59; | C-30; | MS m/z | 505 | $(M + H)^+$ |
| 7-1443; | A-59; | C-31; | MS m/z | 505 | (M + H)+ |
| 7-1444; | A-59; | C-32; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 7-1445; | A-59; | C-33; | MS m/z | 543 | $(M + H)^+$ |
| 7-1446; | A-59; | C-34; | MS m/z | 551 | $(M + H)^+$ |
| 7-1447; | A-59; | C-35; | MS m/z | 560 | $(M + H)^+$ |
| 7-1448; | A-59; | C-36; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 7-1449; | A-67; | C-01; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |

| 7-1450; | A-67; | C-02; | MS m/z | 458 | $(M + H)^{+}$ |
|---------|--------|-------|--------|-----|----------------------|
| 7-1451; | A-67; | C-03; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-1452; | A-67; | C-04; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-1453; | | C-05; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| - | A-67; | | | | |
| 7-1454; | A-67; | C-06; | MS m/z | 484 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1455; | A-67; | C-07; | MS m/z | 486 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1456; | A-67; | C-08; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 7-1457; | A-67; | C-09; | MS m/z | 508 | (M + H) + |
| 7-1458; | A-67; | C-10; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-1459; | A-67·; | C-11; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 7-1460; | A-67; | C-12; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-1461; | A-67; | C-13; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 7-1462; | A-67; | C-14; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 7-1463; | A-67; | C-15; | MS m/z | 562 | $(M + H)^+$ |
| 7-1464; | A-67; | C-16; | MS m/z | 554 | (M + H)+ |
| 7-1465; | A-67; | C-17; | MS m/z | 562 | $(M + H)^+$ |
| 7-1466; | A-67; | C-18; | MS m/z | 474 | (M + H)+ |
| 7-1467; | A-67; | C-19; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 7-1468; | A-67; | C-20; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 7-1469; | A-67; | C-21; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1470; | A-67; | C-22; | MS m/z | 515 | (M + H) ⁺ |
| 7-1471; | A-67; | C-23; | MS m/z | 529 | (M + H)* |
| 7-1472; | A-67; | C-24; | MS m/z | 550 | (M + H)* |
| 7-1473; | A-67; | C-25; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-1474; | A-67; | C-26; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1475; | A-67; | C-27; | MS m/z | 495 | (M + H)+ |
| 7-1476; | A-67; | C-28; | MS m/z | 598 | (M + H) ⁺ |
| 7-1477; | A-67; | C-29; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1478; | A-67; | C-30; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | • |

| 7-1479; | A-67; | C-31; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
|---------|----------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1480; | A-67; | C-32; | MS m/z | 543 | $(M + H)^+$ |
| 7-1481; | A-67; | C-33; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 7-1482; | A-67; | C-34; | MS m/z | 563 | (M + H), |
| 7-1483; | A-67; | C-35; | MS m/z | 572 | $(M + H)^+$ |
| 7-1484; | A-67; | C-36; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 7-1485; | A-68; | C-01; | MS m/z | 416 | (M + H)+ |
| 7-1486; | A-68; | C-02; | MS m/z | 428 | (M + H)+ |
| 7-1487; | A-68; | C-03; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 7-1488; | A-68; | C-04; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 7-1489; | A-68; | C-05; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-1490; | A-68; | C-06; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 7-1491; | A-68; | C-07; | MS m/z | 456 | $(M + H)^+$ |
| 7-1492; | · A-68 ; | C-08; | MS m/z | 472 | . (M + H)+ |
| 7-1493; | A-68; | C-09; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 7-1494; | A-68; | C-10; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-1495; | A-68; | C-11; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-1496; | A-68; | C-12; | MS m/z | 498 | $(M + H)^+$ |
| 7-1497; | A-68; | C-13; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-1498; | A-68; | C-14; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-1499; | A-68; | C-15; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-1500; | A-68; | C-16; | MS m/z | 524 | $(M + H)^+$ |
| 7-1501; | A-68; | C-17; | MS m/z | 532 | (M + H) + |
| 7-1502; | A-68; | C-18; | MS m/z | 444 | (M·+ H)+ |
| 7-1503; | A-68; | C-19; | MS m/z | 496 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1504; | A-68; | C-20; | MS m/z | 537 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1505; | A-68; | C-21; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 7-1506; | A-68; | C-22; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 7-1507; | A-68; | C-23; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 7-1508; | A-68; | C-24; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
|----------|-------|-------|--------|-----|--------------|
| 7-1509; | A-68; | C-25; | MS m/z | 445 | (M + H)+ |
| 7-1510; | A-68; | C-26; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 7-1511; | A-68; | C-27; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 7-1512; | A-68; | C-28; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-1513; | A-68; | C-29; | MS m/z | 471 | (M + H)+ |
| 7-1514; | A-68; | C-30; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1515; | A-68; | C-31; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1516; | A-68; | C-32; | MS m/z | 513 | $(M + H)^+$ |
| 7-1517; | A-68; | C-33; | MS m/z | 525 | (M· + H) + · |
| 7-1518; | A-68; | C-34; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 7-1519; | A-68; | C-35; | MS m/z | 542 | $(M + H)^+$ |
| 7-1520; | A-68; | C-36; | MS m/z | 537 | (M + H) + |
| 7-1521; | A-69; | C-01; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 7-1522 ; | A-69; | C-02; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 7-1523; | A-69; | C-03; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 7-1524; | A-69; | C-04; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-1525; | A-69; | C-05; | MS m/z | 476 | (M + H) + |
| 7-1526; | A-69; | C-06; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 7-1527; | A-69; | C-07; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 7-1528; | A-69; | C-08; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 7-1529; | A-69; | C-09; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-1530; | A-69; | C-10; | MS m/z | 514 | (M + H)+ |
| 7-1531; | A-69; | C-11; | MS m/z | 522 | (M + H)+ |
| 7-1532; | A-69; | C-12; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-1533; | A-69; | C-13; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ |
| 7-1534; | A-69; | C-14; | MS m/z | 544 | (M + H) + |
| 7-1535; | A-69; | C-15; | MS m/z | 562 | (M + H)+ |
| 7-1536; | A-69; | C-16; | MS m/z | 554 | (M + H)* |
| | | | | | |

| 7-1537; | A-69; | C-17; | MS m/z | 562 | $(M + H)^+$ |
|---------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| 7-1538; | A-69; | C-18; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 7-1539; | A-69; | C-19; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 7-1540; | A-69; | C-20; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 7-1541; | A-69; | C-21; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 7-1542; | A-69; | C-22; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 7-1543; | A-69; | C-23; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 7-1544; | A-69; | C-24; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-1545; | A-69; | C-25; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 7-1546; | A-69 ; | C-26; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 7-1547; | A-69; | C-27; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-1548; | A-69; | C-28; | MS m/z | 598 | $(M + H)^+$ |
| 7-1549; | A-69; | C-29; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1550; | A-69; | C-30; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1551; | A-69; | C-31; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 7-1552; | A-69; | C-32; | MS m/z | 543 | $(M + H)^+$ |
| 7-1553; | A-69; | C-33; | MS m/z | 555 | $(M + H)^+$ |
| 7-1554; | A-69; | C-34; | MS m/z | 563 | $(M + H)^+$ |
| 7-1555; | A-69; | C-35; | MS m/z | 572 | $(M + H)^+$ |
| 7-1556; | A-69; | C-36; | MS m/z | 567 | $(M + H)^+$ |
| 7-1557; | A-70; | C-01; | MS m/z | 378 | $(M + H)^+$ |
| 7-1558; | A-70; | C-02; | MS m/z | 390 | $(M + H)^+$ |
| 7-1559; | A-70; | C-03; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 7-1560; | A-70; | C-04; | MS m/z | 406 | $(M + H)^{+}$ |
| 7-1561; | A-70; | C-05; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 7-1562; | A-70; | C-06; | MS m/z | 416 | $(M + H)^+$ |
| 7-1563; | A-70; | C-07; | MS m/z | 418 | (M + H)+ |
| 7-1564; | A-70; | C-08; | MS m/z | 434 | (M + H) |
| 7-1565; | A-70; | C-09; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |

| | | | • | | | |
|---|---------|--------|-------|--------|-----|---------------|
| • | 7-1566; | A-70; | C-10; | MS m/z | 446 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1567; | A-70; | C-11; | MS m/z | 454 | (M + H)+ |
| | 7-1568; | A-70; | C-12; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1569; | A-70 ; | C-13; | MS m/z | 470 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1570; | A-70; | C-14; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1571; | A-70; | C-15; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1572; | A-70; | C-16; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1573; | A-70; | C-17; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1574; | A-70; | C-18; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1575; | A-70; | C-19; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1576; | A-70; | C-20; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1577; | A-70; | C-21; | MS m/z | 421 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1578; | A-70; | C-22; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1579; | A-70; | C-23; | MS m/z | 461 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1580; | A-70; | C-24; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1581; | A-70; | C-25; | MS m/z | 407 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1582; | A-70; | C-26; | MS m/z | 419 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1583; | A-70; | C-27; | MS m/z | 427 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1584; | A-70; | C-28; | MS m/z | 530 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1585; | A-70; | C-29; | MS m/z | 433 | $(M + H)_{+}$ |
| | 7-1586; | A-70; | C-30; | MS m/z | 449 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1587; | A-70 ; | C-31; | MS m/z | 449 | $(M + H)^{+}$ |
| | 7-1588; | A-70 ; | C-32; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1589; | A-70; | C-33; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1590; | A-70; | C-34; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1591; | A-70; | C-35; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1592; | A-70; | C-36; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1593; | A-71; | C-01; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| | 7-1594; | A-71; | C-02; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |

| 7-1595; | A-71; | C-03; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
|---------|-------|-------|----------|-----|---------------|
| 7-1596; | A-71; | C-04; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 7-1597; | A-71; | C-05; | MS m/z · | 482 | (M + H) + |
| 7-1598; | A-71; | C-06; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 7-1599; | A-71; | C-07; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 7-1600; | A-71; | C-08; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 7-1601; | A-71; | C-09; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 7-1602; | A-71; | C-10; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 7-1603; | A-71; | C-11; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 7-1604; | A-71; | C-12; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 7-1605; | A-71; | C-13; | MS m/z | 544 | (M + H) + |
| 7-1606; | A-71; | C-14; | MS m/z | 550 | $(M + H)^+$ |
| 7-1607; | A-71; | C-15; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-1608; | A-71; | C-16; | MS m/z | 560 | (M + H)+ |
| 7-1609; | A-71; | C-17; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 7-1610; | A-71; | C-18; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 7-1611; | A-71; | C-19; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 7-1612; | A-71; | C-20; | MS m/z | 573 | $(M + H)^+$ |
| 7-1613; | A-71; | C-21; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 7-1614; | A-71; | C-22; | MS m/z | 521 | $(M + H)^+$ |
| 7-1615; | A-71; | C-23; | MS m/z | 535 | (M + H)+ |
| 7-1616; | A-71; | C-24; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 7-1617; | A-71; | C-25; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 7-1618; | A-71; | C-26; | MS m/z | 493 | $(M + H)^{i}$ |
| 7-1619; | A-71; | C-27; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 7-1620; | A-71; | C-28; | MS m/z | 604 | $(M + H)^+$ |
| 7-1621; | A-71; | C-29; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 7-1622; | A-71; | C-30; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 7-1623; | A-71; | C-31; | MS m/z | 523 | (M + H) |

7-1624; A-71; C-32; MS m/z 549 (M + H)⁺

7-1625; A-71; C-33; MS m/z 561 (M + H)⁺

7-1626; A-71; C-34; MS m/z 569 (M + H)⁺

7-1627; A-71; C-35; MS m/z 578 (M + H)⁺

7-1628; A-71; C-36; MS m/z 573 (M + H)⁺

(h) 化合物 (I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR³R⁴、-NR⁴R7、機器データの順に示す。

8-1; A-25; C-13; MS m/z 495 $(M + H)^+$

8-2; A-25; C-14; MS m/z 501 $(M + H)^+$

8-3; A-25; C-15; MS m/z 519 $(M + H)^+$

8-4; A-25; C-16; MS m/z 511 $(M + H)^+$

8-5; A-25; C-17; MS m/z 519 $(M + H)^+$

8-6; A-25; C-18; MS m/z 431 $(M + H)^+$

8-7; A-25; C-19; MS m/z 483 $(M + H)^+$

8-8; A-25; C-20; MS m/z 524 (M + H)

8-9; A-25; C-21; MS m/z 446 $(M + H)^+$

8-10; A-25; C-22; MS m/z 472 (M + H)

8-11; A-25; C-23; MS m/z 486 $(M + H)^+$

8-12; A-25; C-24; MS m/z 507 $(M + H)^+$

8-13; A-27; C-13; MS m/z 535 $(M + H)^+$

8-14; A-27; C-14; MS m/z 541 $(M + H)^+$

8-15; A-27; C-15; MS m/z 559 $(M + H)^+$

8-16; A-27; C-16; MS m/z 551 $(M + H)^+$

8-17; A-27; C-17; MS m/z 559 $(M + H)^+$

8-18; A-27; C-18; MS m/z 471 $(M + H)^+$



| 8-19; | A-27; | C-19; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 8-20; | A-27; | C-20 | | | |
| 8-21; | A-27; | C-21; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 8-22; | A-27; | C-22 | | | |
| 8-23; | A-27; | C-23; | MS m/z | 526 | $(M + H)^+$ |
| 8-24; | A-27; | C-24; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 8-25; | A-28; | C-13; | MS m/z | 565 | $(M + H)^+$ |
| 8-26; | A-28; | C-14; | MS m/z | 571 | $(M + H)^+$ |
| 8-27; | A-28; | C-15; | MS m/z | 589 | $(M + H)^+$ |
| 8-28; | A-28; | C-16; | MS m/z | 581 | $(M + H)^+$ |
| 8-29; | A-28; | C-17; | MS m/z | 589 | $(M + H)^+$ |
| 8-30; | A-28; | C-18; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 8-31; | A-28; | C-19; | MS m/z | 553 | $(M + H)^+$ |
| 8-32; | A-28; | C-20; | MS m/z | 594 | $(M + H)^+$ |
| 8-33; | A-28; | C-21; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 8-34; | A-28; | C-22 | | | |
| 8-35; | A-28; | C-23; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 8-36; | A-28; | C-24; | MS m/z | 577 | $(M + H)^+$ |
| 8-37; | A-42; | C-13; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 8-38; | A-42; | C-14; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 8-39; | A-42; | C-15; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 8-40; | A-42; | C-16; | MS m/z | 496 | $(M + H)^+$ |
| 8-41; | A-42; | C-17; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 8-42; | A-42; | C-18; | MS m/z | 416 | $(M + H)^+$ |
| 8-43; | A-42; | C-19; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 8-44; | A-42; | C-20; | MS m/z | 509 | $(M + H)^+$ |
| 8-45; | A-42; | C-21; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 8-46; | A-42; | C-22 | | | |
| 8-47; | A-42; | C-23; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |



| 8-48; | A-42; | C-24; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 8-49; | A-59; | C-13; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 8-50; | A-59; | C-14; | MS m/z | 538 | (M + H) + |
| 8-51; | A-59; | C-15; | MS m/z | 556 | $(M + H)^+$ |
| 8-52; | A-59; | C-16; | MS m/z | 548 | $(M + H)^+$ |
| 8-53; | A-59; | C-17; | MS m/z | 556 | (M + H) ⁺ |
| 8-54; | A-59; | C-18; | MS m/z | 468 | (M + H) ⁺ |
| 8-55; | A-59; | C-19; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 8-56; | A-59; | C-20 | | | |
| 8-57; | A-59; | C-21; | MS m/z | 483 | $(M + H)^+$ |
| 8-58; | A-59; | C-22 | | | |
| 8-59; | A-59; | C-23; | MS m/z | 523 | $(M + H)^+$ |
| 8-60; | A-59; | C-24; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 8-61; | A-67; | C-13; | MS m/z | 544 | $(M + H)^+$ |
| 8-62; | A-67; | C-14; | MS m/z | 550 | (M + H)+ |
| 8-63; | A-67; | C-15; | MS m/z | 568 | $(M + H)^+$ |
| 8-64; | A-67; | C-16; | MS m/z | 560 | (M + H) ⁺ |
| 8-65; | A-67; | C-17; | MS m/z | 568 | (M + H) + |
| 8-66; | A-67; | C-18; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 8-67; | A-67; | C-19; | MS m/z | 532 | (M + H).+ |
| 8-68; | A-67; | C-20 | | | |
| 8-69; | A-67; | C-21; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 8-70; | A-67; | C-22 | | | |
| 8-71; | A-67; | C-23; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 8-72; | A-67; | C-24; | MS m/z | 556 | (M + H) ⁺ |
| 8-73; | A-68; | C-13; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 8-74; | A-68; | C-14; | MS m/z | 520 | (M + H) + |
| 8-75; | A-68; | C-15; | MS m/z | 538 | (M + H)+ |
| 8-76; | A-68; | C-16; | MS m/z | 530 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 8-77; | A-68; | C-17; | MS m/z | 538 | $(M + H)^+$ | |
|-------|-------|-------|--------|-----|-------------|--|
| | | | | | | |

$$8-78$$
; $A-68$; $C-18$; $MS m/z$ 450 $(M + H)^+$

$$8-79$$
; A-68; C-19; MS m/z 502 (M + H)⁺

$$8-81$$
; A-68; C-21; MS m/z 465 (M + H)⁺

$$8-83$$
; $A-68$; $C-23$; $MS m/z$ 505 $(M + H)^+$

$$8-84$$
; A-68; C-24; MS m/z 526 (M + H)⁺

$$8-85$$
; A-69; C-13; MS m/z 544 (M + H)⁺

$$8-86$$
; $A-69$; $C-14$; $MS m/z$ 550 $(M + H)^+$

$$8-87$$
; $A-69$; $C-15$; $MS m/z$ 568 $(M + H)^+$

$$8-88$$
; A-69; C-16; MS m/z 560 (M + H)⁺

$$8-89$$
; $A-69$; $C-17$; $MS m/z$ 568 $(M + H)^+$

$$8-90$$
; $A-69$; $C-18$; $MS m/z$ 480 $(M + H)^+$

$$8-91$$
; A-69; C-19; MS m/z 532 (M + H)⁺

$$8-93$$
; A-69; C-21; MS m/z 495 (M + H)⁺

8-94; A-69; C-22

8-95; A-69; C-23; MS m/z 535 (M + H)⁺

8-96; A-69; C-24; MS m/z 556 $(M + H)^+$

(i) 化合物(I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR³R⁴、-NR⁶R7、機器データの順に示す。

9-1; A-09; C-01; MS m/z 438 (M + H)⁺

9-2; A-09; C-02; MS m/z 450 (M + H)⁺

9-3; A-09; C-03; MS m/z 462 (M + H)⁺

| 9-4; | A-09; | C-04; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
|-------|---------------------|-------|--------|-----|-------------|
| 9-5; | A-09; | C-05; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 9-6; | A-09; | C-06; | MS m/z | 476 | (M + H)+ |
| 9-7; | A-09; | C-07; | MS m/z | 478 | (M + H) + |
| 9-8; | A-09; | C-08; | MS m/z | 494 | (M + H) + |
| 9-9; | A-09 _. ; | C-09; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
| 9-10; | A-09; | C-10; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 9-11; | A-09; | C-11; | MS m/z | 514 | (M + H)+ |
| 9-12; | A-09; | C-12; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 9-13; | A-10 ; | C-01; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 9-14; | A-10 ; | C-02; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 9-15; | A-10; | C-03; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 9-16; | A-10; | C-04; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 9-17; | A-10; | C-05; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 9-18; | A-10; | C-06; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 9-19; | A-10 ; | C-07; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 9-20; | A-10 ; | C-08; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 9-21; | A-10 ; | C-09; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 9-22; | A-10; | C-10; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 9-23; | A-10 ; | C-11; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 9-24; | A-10 ; | C-12; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 9-25; | A-11 ; | C-01; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 9-26; | A-11 ; | C-02; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 9-27; | A-11 ; | C-03; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
| 9-28; | A-11; | C-04; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 9-29; | A-11; | C-05; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 9-30; | A-11; | C-06; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 9-31; | A-11; | C-07; | MS m/z | 478 | (M + H)+ |
| 9-32; | A-11 ; | C-08; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |

| 9-33; | A-11; | C-09; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
|-------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 9-34; | A-11; | C-10; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 9-35; | A-11; | C-11; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 9-36; | A-11; | C-12; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 9-37; | A-12; | C-01; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 9-38; | A-12; | C-02; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 9-39; | A-12; | C-03; | MS m/z | 462 | (M + H) + |
| 9-40; | A-12; | C-04; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 9-41; | A-12; | C-05; | MS m/z | 468 | $(M + H)^+$ |
| 9-42; | A-12; | C-06; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 9-43; | A-12; | C-07; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 9-44; | A-12; | C-08; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 9-45; | A-12; | C-09; | MS m/z | 500 | (M + H) + |
| 9-46; | A-12; | C-10; | MS m/z | 506 | (M + H) ⁺ |
| 9-47; | A-12; | C-11; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 9-48; | A-12; | C-12; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 9-49; | A-13; | C-01; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 9-50; | A-13; | C-02; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
| 9-51; | A-13; | C-03; | MS m/z | 470 | $(M + H)^+$ |
| 9-52; | A-13; | C-04; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 9-53; | A-13; | C-05; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 9-54; | A-13; | C-06; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 9-55; | A-13; | C-07; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 9-56; | A-13; | C-08; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 9-57; | A-13; | C-09; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 9-58; | A-13; | C-10; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| 9-59; | A-13; | C-11; | MS m/z | 522 | (M ·+ H) + |
| 9-60; | A-13; | C-12; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 9-61; | A-14; | C-01; | MS m/z | 446 | (M + H) |

| A-14; | C-02; | MS m/z | 458 | $(M + H)^+$ |
|---|---|---|---|---|
| A-14; | C-03; | MS m/z | 470 | (M + H)+ |
| A-14; | C-04; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-05; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-06; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-07; | MS m/z | 486 | (M + H) + |
| A-14; | C-08; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-09; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-10; | MS m/z | 514 | $(M + H)^+$ |
| A-14·; | C-11; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| A-14; | C-12; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-01; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-02; | MS m/z . | 466 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-03; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-04; | MS m/z | 482 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-05; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-06; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-07; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-08; | MS m/z | 510 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-09; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-10; | MS m/z | 522 | $(M \rightarrow H)^+$ |
| | | , - | 022 | $(M + H)^+$ |
| A-15; | C-11; | MS m/z | | $(M + H)^+$ |
| | | | 530 | |
| A-15; | C-12; | MS m/z | 530 536 | (M + H)+ |
| A-15; A-16; | C-12; C-01; | MS m/z MS m/z | 530 536 460 | $(M + H)^+$ |
| A-15; A-16; A-16; | C-12; C-01; C-02; | MS m/z MS m/z MS m/z | 530 536 460 472 | $(M + H)^{+}$ $(M + H)^{+}$ $(M + H)^{+}$ |
| A-15; A-16; A-16; A-16; | C-12; C-01; C-02; C-03; | MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z | 530 536 460 472 484 | (M + H) ⁺ (M + H) ⁺ (M + H) ⁺ |
| A-15; A-16; A-16; A-16; A-16; | C-12; C-01; C-02; C-03; C-04; | MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z MS m/z | 530 536 460 472 484 488 | (M + H) + (M + H) + (M + H) + (M + H) + (M + H) + |
| | A-14; A-14; A-14; A-14; A-14; A-14; A-14; A-14; A-15; A-15; A-15; A-15; A-15; A-15; A-15; A-15; | A-14; C-04; A-14; C-05; A-14; C-06; A-14; C-07; A-14; C-08; A-14; C-09; A-14; C-10; A-14; C-11; A-14; C-12; A-15; C-01; A-15; C-03; A-15; C-04; A-15; C-06; A-15; C-06; A-15; C-06; A-15; C-08; A-15; C-08; A-15; C-09; | A-14; C-04; MS m/z A-14; C-05; MS m/z A-14; C-06; MS m/z A-14; C-06; MS m/z A-14; C-07; MS m/z A-14; C-08; MS m/z A-14; C-09; MS m/z A-14; C-10; MS m/z A-14; C-10; MS m/z A-14; C-11; MS m/z A-14; C-12; MS m/z A-15; C-01; MS m/z A-15; C-03; MS m/z A-15; C-04; MS m/z A-15; C-06; MS m/z A-15; C-07; MS m/z A-15; C-08; MS m/z | A-14; C-04; MS m/z 474 A-14; C-05; MS m/z 476 A-14; C-06; MS m/z 484 A-14; C-07; MS m/z 486 A-14; C-08; MS m/z 502 A-14; C-09; MS m/z 508 A-14; C-09; MS m/z 514 A-14; C-10; MS m/z 514 A-14; C-11; MS m/z 522 A-14; C-12; MS m/z 528 A-15; C-01; MS m/z 454 A-15; C-02; MS m/z 466 A-15; C-04; MS m/z 482 A-15; C-06; MS m/z 484 A-15; C-06; MS m/z 494 A-15; C-07; MS m/z 494 A-15; C-08; MS m/z 510 A-15; C-09; MS m/z 516 |



$$9-92$$
; A-16; C-08; MS m/z 516 (M + H)⁺

$$9-93$$
; A-16; C-09; MS m/z 522 (M + H)⁺

$$9-94$$
; A-16; C-10; MS m/z 528 (M + H)⁺

$$9-95$$
; A-16; C-11; MS m/z 536 (M + H)⁺

$$9-96$$
; A-16; C-12; MS m/z 542 (M + H)⁺

(j) 化合物 (I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-NR6R7、機器データの順に示す。

$$10-1$$
; A-25; C-01; MS m/z 335 (M + H)⁺

$$10-2$$
; A-25; C-02; MS m/z 347 (M + H)⁺

$$10-3$$
; A-25; C-03; MS m/z 359 (M + H)⁺

$$10-4$$
; A-25; C-04; MS m/z 363 (M + H)⁺

$$10-5$$
; A-25; C-05; MS m/z 365 (M + H)⁺

$$10-6$$
; A-25; C-06; MS m/z 373 (M + H)⁺

10-7; A-25; C-07

$$10-8$$
; A-25; C-08; MS m/z 391 (M + H)⁺

$$10-9$$
; A-25; C-09; MS m/z 397 (M + H)⁺

$$10-10$$
; A-25; C-10; MS m/z 403 (M + H)⁺

10-11; A-25; C-11; MS m/z 411
$$(M + H)^+$$

$$10-12$$
; A-25; C-12; MS m/z 417 (M + H)*

$$10-13$$
; A-27; C-01; MS m/z 375 (M + H)⁺

$$10-14$$
; A-27; C-02; MS m/z 387 (M + H)⁺

$$10-15$$
; A-27; C-03; MS m/z 399 (M + H)⁺

$$10-16$$
; A-27; C-04; MS m/z 403 (M + H)⁺

$$10-17$$
; A-27; C-05; MS m/z 405 (M + H)⁺



| 10-18; | A-27; | C-06; | MS m/z | 413 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 10-19; | A-27; | C-07; | MS m/z | 415 | $(M + H)^+$ |
| 10-20; | A-27; | C-08; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 10-21; | A-27; | C-09; | MS m/z | 437 | (M + H) + |
| 10-22; | A-27; | C-10; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 10-23; | A-27; | C-11; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 10-24; | A-27; | C-12; | MS m/z | 457 | (M + H); |
| 10-25; | A-28; | C-01; | MS m/z | 405 | $(M + H)^{+}$ |
| 10-26; | A-28; | C-02; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 10-27; | A-28; | C-03; | MS m/z | 429 | $(M + H)^{+}$ |
| 10-28; | A-28; | C-04; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 10-29; | A-28; | C-05; | MS m/z | 435 | $(M + H)^+$ |
| 10-30; | A-28; | C-06; | MS m/z | 443 | (M + H)+ |
| 10-31; | A-28; | C-07; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 10-32; | A-28; | C-08; | MS m/z | 461 | (M + H)+ |
| 10-33; | A-28; | C-09; | MS m/z | 467 | $(M + H)^+$ |
| 10-34; | A-28; | C-10; | MS m/z | 473 | (M + H)+ |
| 10-35; | A-28; | C-11; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 10-36; | A-28; | C-12; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 10-37; | A-42; | C-01; | MS m/z | 320 | (M + H)+ |
| 10-38; | A-42; | C-02; | MS m/z | 332 | $(M + H)^+$ |
| 10-39; | A-42; | C-03; | MS m/z | 344 | $(M + H)^+$ |
| 10-40; | A-42; | C-04; | MS m/z | 348 | $(M + H)^+$ |
| 10-41; | A-42; | C-05; | MS m/z | 350 | $(M + H)^+$ |
| 10-42; | A-42; | C-06; | MS m/z | 358 | $(M + H)^+$ |
| 10-43; | A-42; | C-07; | MS m/z | 360 | (M + H)* |
| 10-44; | A-42; | C-08; | MS m/z | 376 | $(M + H)^+$ |
| 10-45; | A-42; | C-09; | MS m/z | 382 | (M + H)+ |
| 10-46; | A-42; | C-10; | MS m/z | 388 | (M + H)+ |
| | | | | | |

| 10-47; | A-42; | C-11; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 10-48; | A-42; | C-12; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 10-49; | A-59; | C-01; | MS m/z | 372 | $(M + H)_{+}$ |
| 10-50; | A-59; | C-02; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 10-51; | A-59; | C-03; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 10-52; | A-59; | C-04; | MS m/z | 400 | $(M + H)^+$ |
| 10-53; | A-59; | C-05; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 10-54; | A-59; | C-06; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 10-55; | A-59; | C-07; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 10-56; | A-59; | C-08; | MS m/z | 428 | $(M + H)^+$ |
| 10-57; | A-59; | C-09; | MS m/z | 434 | $(M + H)^+$ |
| 10-58; | A-59; | C-10; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 10-59; | A-59; | C-11; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 10-60; | A-59; | C-12; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 10-61; | A-67; | C-01; | MS m/z | 384 | $(M + H)^+$ |
| 10-62; | A-67; | C-02; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 10-63; | A-67; | C-03; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 10-64; | A-67; | C-04; | MS m/z | 412 | $(M + H)^+$ |
| 10-65; | A-67; | C-05; | MS m/z | 414 | $(M + H)^+$ |
| 10-66; | A-67; | C-06; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |
| 10-67; | A-67; | C-07; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 10-68; | A-67; | C-08; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 10-69; | A-67; | C-09; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 10-70; | A-67; | C-10; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 10-71; | A-67; | C-11; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 10-72; | A-67; | C-12; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 10-73; | A-68; | C-01; | MS m/z | 354 | $(M + H)^+$ |
| 10-74; | A-68; | C-02; | MS m/z | 366 | $(M + H)^+$ |
| 10-75; | A-68; | C-03; | MS m/z | 378 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 10-76; | A-68; | C-04; | MS m/z | 382 | $(M + H)^+$ |
|---------|---------------|-------|--------|-------|----------------------|
| 10-77; | A-68; | C-05; | MS m/z | 384 | (M + H)+ |
| 10-78; | A-68; | C-06; | MS m/z | 392 | (M + H)+ |
| 10-79; | A-68; | C-07; | MS m/z | 394 | (M + H)+ |
| 10-80; | A-68; | C-08; | MS m/z | 410 | (M + H)+ |
| 10-81; | A-68; | C-09; | MS m/z | 416 | (M + H)+ |
| 10-82; | A-68; | C-10; | MS m/z | 422 | (M + H)+ |
| 10-83; | A-68; | C-11; | MS m/z | 430 | (M + H)+ |
| 10-84; | A-68; | C-12; | MS m/z | 436 | (M + H)+ |
| 10-85; | A-69; | C-01; | MS m/z | 384 · | (M + H)+ |
| 10-86; | A-69; | C-02; | MS m/z | 396 | (M + H)+ |
| 10-87; | A-69; | C-03; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 10-88; | A-69; | C-04; | MS m/z | 412 | (M + H)+ |
| 10-89; | A-69; | C-05; | MS m/z | 414 | (M + H) + |
| 10-90; | A-69; | C-06; | MS m/z | 422 | (M + H) ⁺ |
| 10-91; | A-69; | C-07; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 10-92; | A-69; | C-08; | MS m/z | 440 | $(M + H)^+$ |
| 10-93; | A-69; | C-09; | MS m/z | 446 | $(M + H)^+$ |
| 10-94; | A-69; | C-10; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 10-95; | A-69; | C-11; | MS m/z | 460 | (M + H)* |
| 10-96; | A-69; | C-12; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| (1-) 14 | 本版 (T) | のうち | | | |

(k) 化合物(I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、 $-NR^3R^4$ 、 $-NR^6R^7$ 、機器データの順に示す。 11-1; A-19; C-13; MS m/z 472 (M + H) $^+$

| 11-2; | A-25; | C-01; | MS m/z | 349 | (M + H)+ |
|--------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 11-3; | A-25; | C-02; | MS m/z | 361 | $(M + H)_{+}$ |
| 11-4; | A-25; | C-03; | MS m/z | 373 | (M + H) |
| 11-5; | A-25; | C-04; | MS m/z | 377 | (M + H), |
| 11-6; | A-25; | C-05; | MS m/z | 379 | $(M + H)^+$ |
| 11-7; | A-25; | C-06; | MS m/z | 387 | (M + H)+ |
| 11-8; | A-25; | C-07; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 11-9; | A-25; | C-08; | MS m/z | 405 | (M + H) + |
| 11-10; | A-25; | C-09; | MS m/z | 411 | $(M + H)^+$ |
| 11-11; | A-25; | C-10; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 11-12; | A-25; | C-11; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 11-13; | A-25; | C-12; | MS m/z | 431 | $(M + H)^+$ |
| 11-14; | A-27; | C-01; | MS m/z | 389 | $(M + H)^+$ |
| 11-15; | A-27; | C-02; | MS m/z | 401 | $(M + H)^+$ |
| 11-16; | A-27; | C-03; | MS m/z | 413 | (W + H)+ |
| 11-17; | A-27; | C-04; | MS m/z | 417 | $(M + H)^+$ |
| 11-18; | A-27; | C-05; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 11-19; | A-27; | C-06; | MS m/z | 427 | $(M + H)^+$ |
| 11-20; | A-27; | C-07; | MS m/z | 429 | $(M + H)^+$ |
| 11-21; | A-27; | C-08; | MS m/z | 445 | $(M + H)^+$ |
| 11-22; | A-27; | C-09; | MS m/z | 451 | $(M + H)^+$ |
| 11-23; | A-27; | C-10; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 11-24; | A-27; | C-11; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 11-25; | A-27; | C-12; | MS m/z | 471 | $(M + H)^+$ |
| 11-26; | A-28; | C-01; | MS m/z | 419 | $(M + H)^+$ |
| 11-27; | A-28; | C-02; | MS m/z | 431 | (M + H)+ |
| 11-28; | A-28; | C-03; | MS m/z | 443 | $(M + H)^+$ |
| 11-29; | A-28; | C-04; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 11-30; | A-28; | C-05; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 11-31; | A-28; | C-06; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| 11-32; | A-28; | C-07; | MS m/z | 459 | $(M + H)^+$ |
| 11-33; | A-28; | C-08; | MS m/z | 475 | $(M + H)^+$ |
| 11-34; | A-28; | C-09; | MS m/z | 481 | $(M + H)^+$ |
| 11-35; | A-28; | C-10; | MS m/z | 487 | $(M + H)^+$ |
| 11-36; | A-28; | C-11; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 11-37; | A-28; | C-12; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 11-38; | A-42; | C-01; | MS m/z | 334 | $(M + H)^+$ |
| 11-39; | A-42; | C-02; | MS m/z | 346 | $(M + H)^+$ |
| 11-40; | A-42; | C-03; | MS m/z | 358 | $(M + H)^+$ |
| 11-41; | A-42; | C-04; | MS m/z | 362 | $(M + H)^+$ |
| 11-42; | A-42; | C-05; | MS m/z | 364 | $(M + H)^+$ |
| 11-43; | A-42; | C-06; | MS m/z | 372 | $(M + H)^+$ |
| 11-44; | A-42; | C-07; | MS m/z | 374 | $(M + H)^+$ |
| 11-45; | A-42; | C-08; | MS m/z | 390 | $(M + H)^+$ |
| 11-46; | A-42; | C-09; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 11-47; | A-42; | C-10; | MS m/z | 402 | $(M + H)^+$ |
| 11-48; | A-42; | C-11; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 11-49; | A-42; | C-12; | MS m/z | 416 | $(M + H)^+$ |
| 11-50; | A-59; | C-01; | MS m/z | 386 | $(M + H)^+$ |
| 11-51; | A-59; | C-02; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 11-52; | A-59; | C-03; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 11-53; | A-59; | C-04; | MS m/z | 414 | $(M + H)^+$ |
| 11-54; | A-59; | C-05; | MS m/z | 416 | $(M + H)^+$ |
| 11-55; | A-59; | C-06; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 11-56; | A-59; | C-07; | MS m/z | 426 | $(M + H)^+$ |
| 11-57; | A-59; | C-08; | MS_m/z | 442 | $(M + H)^+$ |
| 11-58; | A-59; | C-09; | MS m/z | 448 | $(M + H)^+$ |
| 11-59; | A-59; | C-10; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

| 11-60; | A-59; | C-11; | MS m/z | 462 | $(M + H)^+$ |
|-----------|-------|-------|---------|-----|----------------------|
| 11-61; | A-59; | C-12; | ·MS m/z | 468 | (M + H)+ |
| 11-62; | A-67; | C-01; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 11-63; | A-67; | C-02; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 11-64; | A-67; | C-03; | MS m/z | 422 | (M + H)+ |
| 11-65; | A-67; | C-04; | MS m/z | 426 | $(M + H)^+$ |
| 11-66; | A-67; | C-05; | MS m/z | 428 | (M + H) + |
| 11-67; | A-67; | C-06; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 11-68; | A-67; | C-07; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| ··11-69 ; | A-67; | C-08; | MS m/z | 454 | $(M + H)^+$ |
| 11-70; | A-67; | C-09; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 11-71; | A-67; | C-10; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 11-72; | A-67; | C-11; | MS m/z | 474 | $(M + H)^+$ |
| 11-73; | A-67; | C-12; | MS m/z | 480 | (M + H) + |
| 11-74; | A-68; | C-01; | MS m/z | 368 | $(M + H)^+$ |
| 11-75; | A-68; | C-02; | MS m/z | 380 | $(M + H)^+$ |
| 11-76; | A-68; | C-03; | MS m/z | 392 | $(M + H)^+$ |
| 11-77; | A-68; | C-04; | MS m/z | 396 | $(M + H)^+$ |
| 11-78; | A-68; | C-05; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 11-79; | A-68; | C-06; | MS m/z | 406 | $(M + H)^+$ |
| 11-80; | A-68; | C-07; | MS m/z | 408 | $(M + H)^+$ |
| 11-81; | A-68; | C-08; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 11-82; | A-68; | C-09; | MS m/z | 430 | $(M + H)^+$ |
| 11-83; | A-68; | C-10; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 11-84; | A-68; | C-11; | MS m/z | 444 | $(M + H)^+$ |
| 11-85; | A-68; | C-12; | MS m/z | 450 | (M + H) ⁺ |
| 11-86; | A-69; | C-01; | MS m/z | 398 | $(M + H)^+$ |
| 11-87; | A-69; | C-02; | MS m/z | 410 | $(M + H)^+$ |
| 11-88; | A-69; | C-03; | MS m/z | 422 | $(M + H)^+$ |



11-90; A-69; C-05; MS
$$m/z$$
 428 $(M + H)^+$

11-91; A-69; C-06; MS m/z 436
$$(M + H)^+$$

$$11-92$$
; A-69; C-07; MS m/z 438 (M + H)⁺

$$11-93$$
; A-69; C-08; MS m/z 454 (M + H)⁺

$$11-94$$
; A-69; C-09; MS m/z 460 (M + H)⁺

$$11-95$$
; A-69; C-10; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$11-96$$
; A-69; C-11; MS m/z 474 (M + H)⁺

$$11-97$$
; A-69; C-12; MS m/z 480 (M + H)⁺

(1) 化合物(I) のうち、

で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-NR6aR7a、機器データの順に示す。

| 12-1; $A-05$; | C-32; | MS m/z | 478 | $(M + H)^{+}$ |
|----------------|-------|--------|-----|---------------|
|----------------|-------|--------|-----|---------------|

$$12-2$$
; A-05; C-37; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$12-3$$
; A-05; C-38; MS m/z 479 (M + H)⁺

$$12-4$$
; A-05; C-39; MS m/z 452 (M + H)⁺

12-5; A-05; C-40; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

$$12-6$$
; A-05; C-41; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$12-7$$
; A-05; C-42; MS m/z 450 (M + H)⁺

12-8; A-05; C-43; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

$$12-9$$
; A-05; C-44; MS m/z 438 (M + H)⁺

12-10; A-05; C-45; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

$$12-11$$
; A-05; C-46; MS m/z 447 (M + H)⁺

$$12-12$$
; A-05; C-47; MS m/z 439 (M + H)⁺

$$12-13$$
; A-14; C-32; MS m/z 512 (M + H)⁺

$$12-14$$
; A-14; C-37; MS m/z 500 (M + H)⁺

| 12-15; | A-14; | C-38; | MS m/z | 513 | $(M + H)^{+}$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 12-16; | A-14; | C-39; | MS m/z | 486 | $(M + H)^+$ |
| 12-17; | A-14; | C-40; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
| 12-18; | A-14; | C-41; | MS m/z | 500 | (M + H)+ |
| 12-19; | A-14; | C-42; | MS m/z | 484 | (M + H) + |
| 12-20; | A-14; | C-43; | MS m/z | 484 | (M + H) + |
| 12-21; | A-14; | C-44; | MS m/z | 472 | $(M + H)^+$ |
| 12-22; | A-14; | C-45; | MS m/z | 484 | (M + H) + |
| 12-23; | A-14; | C-46; | MS m/z | 481 | (M + H) + |
| 12-24; | A-14; | C-47; | MS m/z | 473 | (M .+ H) + |
| 12-25; | A-17; | C-32; | MS m/z | 532 | (M + H) + |
| 12-26; | A-17; | C-37; | MS m/z | 520 | (M + H) + |
| 12-27; | A-17; | C-38; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 12-28; | A-17; | C-39; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-29; | A-17; | C-40; | MS m/z | 504 | (M + H) + |
| 12-30; | A-17; | C-41; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 12-31; | A-17; | C-42; | MS m/z | 504 | (M + H) ⁺ |
| 12-32; | A-17; | C-43; | MS m/z | 504 | (M + H)+ |
| 12-33; | A-17; | C-44; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 12-34; | A-17; | C-45; | MS m/z | 504 | (M + H)+ |
| 12-35; | A-17; | C-46; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 12-36; | A-17; | C-47; | MS m/z | 493 | (M + H)+ |
| 12-37; | A-41; | C-32; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 12-38; | A-41; | C-37; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 12-39; | A-41; | C-38; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 12-40; | A-41; | C-39; | MS m/z | 452 | (M + H)+ |
| 12-41; | A-41; | C-40; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-42; | A-41; | C-41; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 12-43; | A-41; | C-42; | MS m/z | 450 | (M + H) + |

| 12-44; | A-41; | C-43; | MS m/z | 450 | (M + H) + |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 12-45; | A-41; | C-44; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 12-46; | A-41; | C-45; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 12-47; | A-41; | C-46; | MS m/z | 447 | (W + H)+ |
| 12-48; | A-41; | C-47; | MS m/z | 439 | $(M + H)_{+}$ |
| 12-49; | A-42; | C-32; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 12-50; | A-42; | C-37; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 12-51; | A-42; | C-38; | MS m/z | 479 | (M + H)+ |
| 12-52; | A-42; | C-39; | MS m/z | 452 | $(M + H)_+$ |
| 12-53; | A-42; | C-40; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-54; | A-42; | C-41; | MS m/z | 466 | (M + H)+ |
| 12-55; | A-42; | C-42; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 12-56; | A-42; | C-43; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-57; | A-42; | C-44; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 12-58; | A-42; | C-45; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 12-59; | A-42; | C-46; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 12-60; | A-42; | C-47; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 12-61; | A-43; | C-32; | MS m/z | 464 | (M + H)+ |
| 12-62; | A-43; | C-37; | MS m/z | 452 | (M + H) + |
| 12-63; | A-43; | C-38; | MS m/z | 465 | (M + H)+ |
| 12-64; | A-43; | C-39; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 12-65; | A-43; | C-40; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 12-66; | A-43; | C-41; | MS m/z | 452 | $(M + H)_{+}$ |
| 12-67; | A-43; | C-42; | MS m/z | 436 | (M + H) ⁺ |
| 12-68; | A-43; | C-43; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 12-69; | A-43; | C-44; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 12-70; | A-43; | C-45; | MS m/z | 436 | (M + H) ⁺ |
| 12-71; | A-43; | C-46; | MS m/z | 433 | (M + H) ⁺ |
| 12-72; | A-43; | C-47; | MS m/z | 425 | (M + H)+ |

| 12-73; | A-44; | C-32; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|
| | | | | | • |
| | | | | | |

$$12-74$$
; A-44; C-37; MS m/z 480 (M + H)⁺

$$12-75$$
; A-44; C-38; MS m/z 493 (M + H)⁺

$$12-76$$
; A-44; C-39; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$12-77$$
; A-44; C-40; MS m/z 464 (M + H)⁺

12-78; A-44; C-41; MS
$$m/z$$
 480 (M + H)⁺

$$12-79$$
; A-44; C-42; MS m/z 464 (M + H)⁺

$$12-80$$
; A-44; C-43; MS m/z 464 (M + H)⁺

$$12-81$$
; A-44; C-44; MS m/z 452 (M + H)⁺

$$12-82$$
; A-44; C-45; MS m/z 464 (M + H)⁺

$$12-83$$
; A-44; C-46; MS m/z 461 (M + H)⁺

$$12-84$$
; A-44; C-47; MS m/z 453 (M + H)⁺

$$12-86$$
; A-45; C-37; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$12-88$$
; A-45; C-39; MS m/z 450 (M - H)⁺

$$12-89$$
; A-45; C-40; MS m/z 450 (M + H)⁺

12-91; A-45; C-42; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

12-98; A-46; C-37; MS m/z 476
$$(M + H)^+$$

$$12-100$$
; A-46; C-39; MS m/z 462 (M + H)⁺

$$12-101$$
; A-46; C-40; MS m/z 460 (M + H)⁺

| 12-102; | A-46; | C-41 | | | |
|---------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 12-103; | A-46; | C-42; | MS m/z | 460 | $(M + H)^+$ |
| 12-104; | A-46; | C-43 | | | |
| 12-105; | A-46; | C-44; | MS m/z | 448 | (M + H)+ |
| 12-106; | A-46; | C-45 | | | |
| 12-107; | A-46; | C-46; | MS m/z | 457 | $(M + H)^+$ |
| 12-108; | A-46; | C-47; | MS m/z | 449 | $(M + H)^+$ |
| 12-109; | A-47; | C-32 | | | |
| 12-110; | A-47; | C-37; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 12-111; | A-47; | C-38 | | | |
| 12-112; | A-47; | C-39; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 12-113; | A-47; | C-40; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-114; | A-47; | C-41; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 12-115; | A-47; | C-42; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-116; | A-47; | C-43 | | | |
| 12-117; | A-47; | C-44; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 12-118; | A-47; | C-45; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 12-119; | A-47; | C-46; | MS m/z | 447 | (M + H)+ |
| 12-120; | A-47; | C-47; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 12-121; | A-48; | C-32; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 12-122; | A-48; | C-37; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 12-123; | A-48; | C-38; | MS m/z | 533 | $(M + H)^+$ |
| 12-124; | A-48; | C-39; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-125; | A-48; | C-40; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 12-126; | A-48; | C-41; | MS m/z | 520 | (M + H) ⁺ |
| 12-127; | A-48; | C-42; | MS m/z | 504 | (M + H)+ |
| 12-128; | A-48; | C-43; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 12-129; | A-48; | C-44; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |

12-130; A-48; C-45; MS m/z

504

 $(M + H)^+$

| 12-131; | A-48; | C-46; | MS m/z | 501 | $(M + H)^{+}$ |
|---------|-------|-------|---------|-----|---------------|
| 12-132; | A-48; | C-47; | MS m/z | 493 | $(M + H)^{+}$ |
| 12-133; | A-49; | C-32; | MS m/z | 530 | (M + H) + |
| 12-134; | A-49; | C-37; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 12-135; | A-49; | C-38; | MS m/z | 531 | $(M + H)^+$ |
| 12-136; | A-49; | C-39; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 12-137; | A-49; | C-40; | MS m/z | 502 | $(M + H)^{+}$ |
| 12-138; | A-49; | C-41; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 12-139; | A-49; | C-42; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 12-140; | A-49; | C-43; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 12-141; | A-49; | C-44; | MS m/z | 490 | $(M + H)^{+}$ |
| 12-142; | A-49; | C-45; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 12-143; | A-49; | C-46; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 12-144; | A-49; | C-47; | MS m/z | 491 | $(M + H)^+$ |
| 12-145; | A-50; | C-32; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 12-146; | A-50; | C-37; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 12-147; | A-50; | C-38; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 12-148; | A-50; | C-39; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 12-149; | A-50; | C-40; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 12-150; | A-50; | C-41; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 12-151; | A-50; | C-42; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 12-152; | A-50; | C-43; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 12-153; | A-50; | C-44; | MS m/z, | 488 | $(M + H)^+$ |
| 12-154; | A-50; | C-45; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 12-155; | A-50; | C-46; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 12-156; | A-50; | C-47; | MS m/z | 489 | $(M + H)^+$ |
| 12-157; | A-51; | C-32; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 12-158; | A-51; | C-37; | MS m/z | 534 | · (M + H) + |
| 12-159; | A-51; | C-38; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |

| 12-160; | A-51; | C-39; | MS m/z | 520 | $(M + H)^{+}$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 12-161; | A-51; | C-40; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 12-162; | A-51; | C-41; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 12-163; | A-51; | C-42; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 12-164; | A-51; | C-43; | MS m/z | 518 | $(M + H)^{+}$ |
| 12-165; | A-51; | C-44; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-166; | A-51; | C-45; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 12-167; | A-51; | C-46; | MS m/z | 515 | $(M + H)^+$ |
| 12-168; | A-51; | C-47; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 12-169; | A-52; | C-32; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 12-170; | A-52; | C-37; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 12-171; | A-52; | C-38; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 12-172; | A-52; | C-39; | MS m/z | 508 | $(M + H)^+$ |
| 12-173; | A-52; | C-40; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-174; | A-52; | C-41; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 12-175; | A-52; | C-42; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-176; | A-52; | C-43; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-177; | A-52; | C-44; | MS m/z | 494 | $(M + H)^+$ |
| 12-178; | A-52; | C-45; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 12-179; | A-52; | C-46; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 12-180; | A-52; | C-47; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 12-181; | A-53; | C-32; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 12-182; | A-53; | C-37; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 12-183; | A-53; | C-38; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 12-184; | A-53; | C-39; | MS m/z | 490 | $(M + H)^+$ |
| 12-185; | A-53; | C-40; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 12-186; | A-53; | C-41; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 12-187; | A-53; | C-42; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 12-188; | A-53; | C-43; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |

12-189;

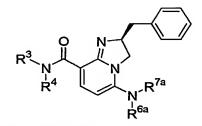
A-53; C-44; MS m/z 476 $(M + H)^+$

12-190; A-53; C-45; MS m/z 488 (M + H)⁺

12-191; A-53; C-46; MS m/z 485 (M + H)⁺

12-192; A-53; C-47; MS m/z 477 (M + H)⁺

(m) 化合物 (I) のうち、



で表される化合物の具体例を化合物番号、-NR3R4、-R6aR7a、機器データの順に示す。

13-1; A-05; C-32; MS m/z 478 $(M + H)^+$

13-2; A-05; C-37; MS m/z 466 (M + H)⁺

13-3; A-05; C-38; MS m/z 479 $(M + H)^+$

13-4; A-05; C-39; MS m/z 452 (M + H)⁺

13-5; A-05; C-40; MS m/z 450 (M + H)⁺

13-6; A-05; C-41; MS m/z 466 (M + H)⁺

13-7; A-05; C-42; MS m/z 450 $(M + H)^+$

13-8; A-05; C-43; MS m/z 450 $(M + H)^+$

13-9; A-05; C-44; MS m/z 438 (M + H)⁺

13-10; A-05; C-45; MS m/z 450 (M + H)⁺

13-11; A-05; C-46; MS m/z 447 $(M + H)^+$

13-12; A-05; C-47; MS m/z 439 (M + H)⁺

13-13; A-14; C-32; MS m/z 512 $(M + H)^+$

13-14; A-14; C-37; MS m/z 500 (M + H)⁺

13-15; A-14; C-38; MS m/z 513 $(M + H)^+$

13-16; A-14; C-39; MS m/z 486 $(M + H)^+$

13-17; A-14; C-40; MS m/z 484 (M + H)⁺

13-18; A-14; C-41; MS m/z 500 $(M + H)^+$

13-19; A-14; C-42; MS m/z 484 (M + H)⁺

| 13-20; | A-14; | C-43; | MS m/z | 484 | $(M + H)^+$ |
|--------|-------|-------|--------|-----|----------------------|
| 13-21; | A-14; | C-44; | MS m/z | 472 | (M + H)+ |
| 13-22; | A-14; | C-45; | MS m/z | 484 | (M + H) ⁺ |
| 13-23; | A-14; | C-46; | MS m/z | 481 | (M + H)+ |
| 13-24; | A-14; | C-47; | MS m/z | 473 | (M + H) + |
| 13-25; | A-17; | C-32; | MS m/z | 532 | $(M + H)^+$ |
| 13-26; | A-17; | C-37; | MS m/z | 520 | (M + H)+ |
| 13-27; | A-17; | C-38; | MS m/z | 533 | (M + H)+ |
| 13-28; | A-17; | C-39; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 13-29; | A-17; | C-40; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 13-30; | A-17; | C-41; | MS m/z | 520 | (M + H) + |
| 13-31; | A-17; | C-42; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 13-32; | A-17; | C-43; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 13-33; | A-17; | C-44; | MS m/z | 492 | $(M + H)^+$ |
| 13-34; | A-17; | C-45; | MS m/z | 504 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-35; | A-17; | C-46; | MS m/z | 501 | $(M + H)^+$ |
| 13-36; | A-17; | C-47; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 13-37; | A-41; | C-32; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
| 13-38; | A-41; | C-37; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 13-39; | A-41; | C-38; | MS m/z | 479 | $(M + H)^+$ |
| 13-40; | A-41; | C-39; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 13-41; | A-41; | C-40; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 13-42; | A-41; | C-41; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 13-43; | A-41; | C-42; | MS m/z | 450 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-44; | A-41; | C-43; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 13-45; | A-41; | C-44; | MS m/z | 438 | $(M + H)^+$ |
| 13-46; | A-41; | C-45; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 13-47; | A-41; | C-46; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 13-48; | A-41; | C-47; | MS m/z | 439 | (M + H)+ |

| 13-49; | A-42; | C-32; | MS m/z | 478 | $(M + H)^+$ |
|--------|--------|-------|---------|-------|----------------------|
| 13-50; | A-42; | C-37; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 13-51; | A-42; | C-38; | MS m/z | 479 | $(M + H)_{+}$ |
| 13-52; | A-42; | C-39; | MS m/z | 452 | (M + H) ⁺ |
| 13-53; | A-42 ; | C-40; | MS m/z | 450 | (M + H)+ |
| 13-54; | A-42; | C-41; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 13-55; | A-42; | C-42; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 13-56; | A-42; | C-43; | MS m/z | 450 | $(M + H)^+$ |
| 13-57; | A-42; | C-44; | MS m/z | 438 | (M + H)+ |
| 13-58; | A-42:; | C-45; | ·MS·m/z | . 450 | (M + H)+ |
| 13-59; | A-42; | C-46; | MS m/z | 447 | $(M + H)^+$ |
| 13-60; | A-42; | C-47; | MS m/z | 439 | $(M + H)^+$ |
| 13-61; | A-43; | C-32; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |
| 13-62; | A-43; | C-37; | MS m/z | 452 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-63; | A-43; | C-38; | MS m/z | 465 | $(M + H)^+$ |
| 13-64; | A-43; | C-39; | MS m/z | 438 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-65; | A-43; | C-40; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 13-66; | A-43 ; | C-41; | MS m/z | 452 | $(M + H)^+$ |
| 13-67; | A-43; | C-42; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 13-68; | A-43; | C-43; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 13-69; | A-43; | C-44; | MS m/z | 424 | $(M + H)^+$ |
| 13-70; | A-43; | C-45; | MS m/z | 436 | $(M + H)^+$ |
| 13-71; | A-43; | C-46; | MS m/z | 433 | $(M + H)^+$ |
| 13-72; | A-43; | C-47; | MS m/z | 425 | $(M + H)^+$ |
| 13-73; | A-44 ; | C-32; | MS m/z | 492 | (M + H) |
| 13-74; | A-44; | C-37; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
| 13-75; | A-44; | C-38; | MS m/z | 493 | $(M + H)^+$ |
| 13-76; | A-44; | C-39; | MS m/z | 466 | $(M + H)^+$ |
| 13-77; | A-44; | C-40; | MS m/z | 464 | $(M + H)^+$ |

| | 13-78; | A-44; | C-41; | MS m/z | 480 | $(M + H)^+$ |
|--|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|
|--|--------|-------|-------|--------|-----|-------------|

13-79;
$$A-44$$
; $C-42$; $MS m/z$ 464 $(M + H)^+$

13-80;
$$A-44$$
; $C-43$; $MS m/z$ 464 $(M + H)^+$

13-81; A-44; C-44; MS m/z
$$452$$
 (M + H)⁺

$$13-82$$
; A-44; C-45; MS m/z 464 (M + H)⁺

13-83; A-44; C-46; MS m/z 461
$$(M + H)^+$$

$$13-84$$
; A-44; C-47; MS m/z 453 (M + H)⁺

$$13-86$$
; A-45; C-37; MS m/z 466 (M + H)⁺

$$13-87$$
; A-45; C-38; MS m/z 477 (M - H)⁺

13-91; A-45; C-42; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

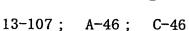
13-98; A-46; C-37; MS
$$m/z$$
 476 $(M + H)^+$

13-101; A-46; C-40; MS
$$m/z$$
 460 $(M + H)^+$

13-103; A-46; C-42; MS
$$m/z$$
 460 (M + H)⁺

13-104; A-46; C-43; MS m/z 460
$$(M + H)^+$$

13-105; A-46; C-44; MS m/z 448
$$(M + H)^+$$



13-108; A-46; C-47; MS
$$m/z$$
 449 (M + H)⁺

13-110; A-47; C-37; MS
$$m/z$$
 466 $(M + H)^+$

$$13-113$$
; A-47; C-40; MS m/z 450 (M + H)⁺

13-115; A-47; C-42; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

13-118; A-47; C-45; MS m/z 450
$$(M + H)^+$$

$$13-121$$
; A-48; C-32; MS m/z 532 (M + H)⁺

$$13-122$$
; A-48; C-37; MS m/z 520 (M + H)⁺

$$13-123$$
; A-48; C-38; MS m/z 533 (M + H)⁺

$$13-124$$
; A-48; C-39; MS m/z 506 (M + H)⁺

$$13-125$$
; A-48; C-40; MS m/z 504 (M + H)⁺

$$13-126$$
; A-48; C-41; MS m/z 520 (M + H)⁺

$$13-127$$
; A-48; C-42; MS m/z 504 (M + H)⁺

$$13-128$$
; A-48; C-43; MS m/z 504 (M + H)⁺

$$13-129$$
; A-48; C-44; MS m/z 492 (M + H)⁺

13-130; A-48; C-45; MS
$$m/z$$
 504 $(M + H)^+$

$$13-131$$
; A-48; C-46; MS m/z 501 (M + H)⁺

$$13-132$$
; A-48; C-47; MS m/z 493 (M + H)⁺

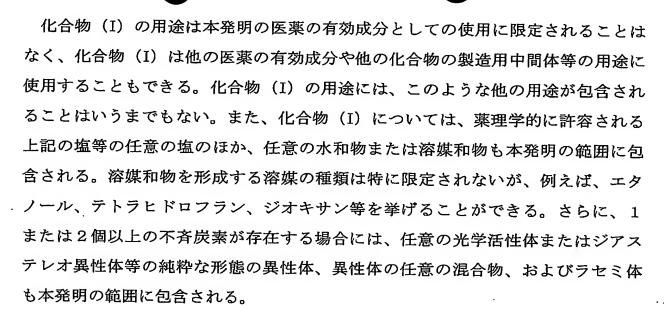
$$13-133$$
; A-49; C-32; MS m/z 530 (M + H)⁺

$$13-134$$
; A-49; C-37; MS m/z 518 (M + H)⁺

$$13-135$$
; A-49; C-38; MS m/z 531 (M + H)⁺

| 13-136; | A-49; | C-39; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
|---------|-------|-------|--------|-----|---------------|
| 13-137; | A-49; | C-40; | MS m/z | 502 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-138; | A-49; | C-41; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |
| 13-139; | A-49; | C-42; | MS m/z | 502 | (M + H)+ |
| 13-140; | A-49; | C-43; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 13-141; | A-49; | C-44; | MS m/z | 490 | (M + H)+ |
| 13-142; | A-49; | C-45; | MS m/z | 502 | (M + H) + |
| 13-143; | A-49; | C-46; | MS m/z | 499 | $(M + H)^+$ |
| 13-144; | A-49; | C-47; | MS m/z | 491 | (M + H)+ |
| 13-145; | A-50; | C-32; | MS m/z | 528 | $(M + H)^+$ |
| 13-146; | A-50; | C-37; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 13-147; | A-50; | C-38; | MS m/z | 529 | $(M + H)^+$ |
| 13-148; | A-50; | C-39; | MS m/z | 502 | $(M + H)^+$ |
| 13-149; | A-50; | C-40; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 13-150; | A-50; | C-41; | MS m/z | 516 | $(M + H)^+$ |
| 13-151; | A-50; | C-42; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 13-152; | A-50; | C-43; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 13-153; | A-50; | C-44; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 13-154; | A-50; | C-45; | MS m/z | 500 | $(M + H)^+$ |
| 13-155; | A-50; | C-46; | MS m/z | 497 | $(M + H)^+$ |
| 13-156; | A-50; | C-47; | MS m/z | 489 | (M + H)+ |
| 13-157; | A-51; | C-32; | MS m/z | 546 | $(M + H)^+$ |
| 13-158; | A-51; | C-37; | MS m/z | 534 | $(M + H)^+$ |
| 13-159; | A-51; | C-38; | MS m/z | 547 | $(M + H)^+$ |
| 13-160; | A-51; | C-39; | MS m/z | 520 | $(M + H)^+$ |
| 13-161; | A-51; | C-40; | MS m/z | 518 | (M + H) + |
| 13-162; | A-51; | C-41; | MS m/z | 534 | (M + H)+ |
| 13-163; | A-51; | C-42; | MS m/z | 518 | (M + H)+ |
| 13-164; | A-51; | C-43; | MS m/z | 518 | $(M + H)^+$ |

| 13-165; | A-51; | C-44; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
|----------|-------|--------|--------|-------|---------------|
| 13-166; | A-51; | C-45; | MS m/z | 518 | (M + H)+ |
| 13-167; | A-51; | C-46; | MS m/z | 515 | (M + H)+ |
| 13-168; | A-51; | C-47; | MS m/z | 507 | $(M + H)^+$ |
| 13-169; | A-52; | C-32; | MS m/z | 534 | (M + H)+ |
| 13-170; | A-52; | C-37; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 13-171; | A-52; | C-38; | MS m/z | 535 | $(M + H)^+$ |
| 13-172 ; | A-52; | C-39; | MS m/z | 508 | (M + H)+ |
| 13-173; | A-52; | C-40; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 13-174; | A-52; | -C-41; | MS m/z | 522 | $(M + H)^+$ |
| 13-175; | A-52; | C-42; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 13-176; | A-52; | C-43; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 13-177; | A-52; | C-44; | MS m/z | 494 | (M + H)+ |
| 13-178; | A-52; | C-45; | MS m/z | 506 | $(M + H)^+$ |
| 13-179; | A-52; | C-46; | MS m/z | 503 | $(M + H)^+$ |
| 13-180; | A-52; | C-47; | MS m/z | 495 | $(M + H)^+$ |
| 13-181; | A-53; | C-32; | MS m/z | 516 | $(W + H)_+$ |
| 13-182; | A-53; | C-37; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 13-183; | A-53; | C-38; | MS m/z | 517 | $(M + H)^+$ |
| 13-184; | A-53; | C-39; | MS m/z | 490 | $(M + H)^{+}$ |
| 13-185; | A-53; | C-40; | MS m/z | . 488 | $(M + H)^+$ |
| 13-186; | A-53; | C-41; | MS m/z | 504 | $(M + H)^+$ |
| 13-187; | A-53; | C-42; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 13-188; | A-53; | C-43; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 13-189; | A-53; | C-44; | MS m/z | 476 | $(M + H)^+$ |
| 13-190; | A-53; | C-45; | MS m/z | 488 | $(M + H)^+$ |
| 13-191; | A-53; | C-46; | MS m/z | 485 | $(M + H)^+$ |
| 13-192; | A-53; | C-47; | MS m/z | 477 | $(M + H)^+$ |
| | | | | | |



以下に、化合物(I)の薬理活性について詳しく説明する。

試験例1:培養β細胞におけるインスリン分泌促進活性

宮崎らによって報告された(エンドクリノロジー、127 巻、126-131 頁、1990年)株化された膵 β 細胞 MIN6 細胞は、インスリン含量およびグルコース刺激によるインスリン分泌量が生体内の膵 β 細胞に近く、グルコース濃度に応答してインスリン分泌が上昇する点において生体内の膵 β 細胞の性質をよく保存している(上記文献およびダイアベトロジア、36 巻、1139-1145 頁、1993年)。また、MIN6 細胞では、糖尿病治療薬として用いられているスルホニルウレア剤、例えばグリベンクラミドに応答して、インスリン分泌が促進される(セルラー・シグナリング、5 巻、777-786 頁、1993年)。

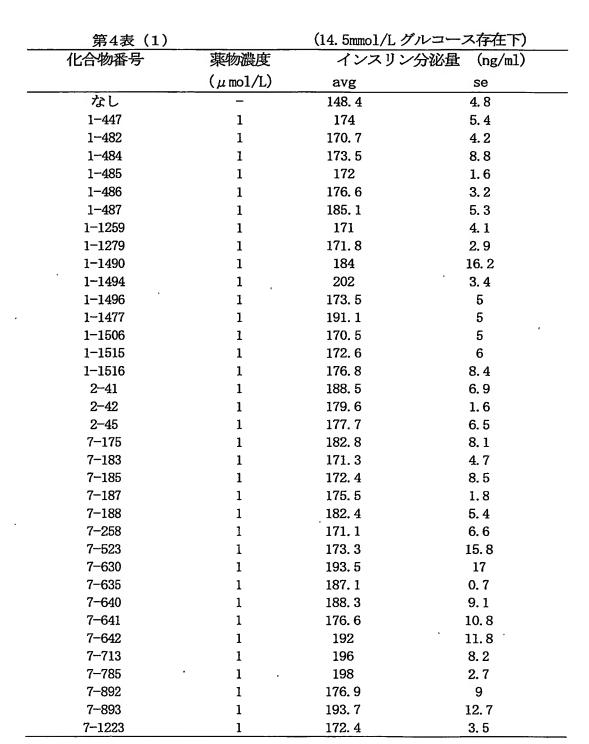
上記 MIN6 細胞の培養、および MIN6 細胞を用いたインスリン分泌試験は、ダイアベトロジア、36 巻、1139-1145 頁、1993 年に記載されている方法に従って行った。14.5mmol/L グルコース存在下において、化合物がインスリン分泌活性に与える影響は以下のようにして集めた細胞培養上清中のインスリン量を測定することにより求めた。24 ウェルプレートで培養した MIN6 細胞を、2 mmol/L グルコースを含む緩衝液 A [119 mmol/L 塩化ナトリウム, 4.74 mmol/L 塩化カリウム, 2.54 mmol/L 塩化カルシウム, 1.19 mmol/L 硫酸マグネシウム, 1.19 mmol/L リン酸二水素カリウム, 10 mmol/L 2-[4-(2-ヒドロキシエチル)-1-ピペラジニル]エタンスルホン酸、0.1 %牛血清アルブミン pH 7.3] 1mLを用いて 2 回洗浄した後、1 mL

の 2 mmol/L グルコースを含む緩衝液 A 中、37℃で 45 分間孵置した。孵置後、培養上清を、各種濃度の試験化合物および 2 mmol/L グルコースを含む緩衝液 A (0.9 mL) と交換し、さらに、37℃で 15 分間孵置した。これに 127 mmol/L のグルコースを含む緩衝液 A (0.1 mL) を加えることにより、MIN6 細胞をグルコース刺激した(最終グルコース濃度:14.5 mmol/L)。刺激後、さらに 37℃で 45 分間孵置し、培養上清を集めた。

一方、5 mmol/L グルコース存在下において、化合物がインスリン分泌活性に与える影響は以下のようにして集めた細胞培養上清中のインスリン量を測定することにより求めた。24 ウェルプレートで培養した MIN6 細胞を、5 mmol/L グルコースを含む緩衝液 A (1 mL) を用いて 2 回洗浄した後、各種濃度の試験化合物および 5 mmol/L グルコースを含む緩衝液 A (0.9 mL) と交換した。この後、37 $^{\circ}$ で 45 分間孵置して(最終グルコース濃度:5 mmol/L)、培養上清を集めた。

培養上清中に分泌された抗体反応性のインスリンは 1%牛血清アルブミン、0.1 % Tween20、0.12%エチレンジアミン四酢酸 (EDTA) 2 ナトリウム塩、0.1%アジ化ナトリウムを含むりん酸緩衝液で希釈した後、酵素免疫測定法、もしくは放射線免疫測定法により定量した。インスリン値はヒトインスリン量 (ng/mL) として示した。結果は、3~4 例の平均値 (avg) およびスタンダードエラー値 (se) で示した。

結果を第4表に示す。







| 第4表(2) | | (14.5mmol/L / | ブルコース存在下) |
|----------|-----------------------|---------------|-------------|
| 化合物番号 | 薬物濃度 | インスリン | /分泌量(ng/ml) |
| | $(\mu \text{mol/L})$ | avg | se |
| 7-1270 | 1 | 177. 2 | 4. 1 |
| 7-1275 | 1 | 180 | 10. 6 |
| 7-1277 | 1 | 179. 6 | 6. 7 |
| 7–1278 | 1 | 192. 7 | 12. 2 |
| 7–1281 | 1 | 182. 4 | 2.7 |
| 7-1290 | 1 | 205. 3 | 10 |
| 7-1454 | . 1 | 174. 7 | 9.8 |
| 7-1374 | 1 | 193. 8 | 2 . |
| 7-1389 | 1 | 194 | 6. 1 |
| 7–1397 | 1 | 219 | 7. 2 |
| 7-1398 | 1 | 164. 5 | 14 |
| 7–1410 | 1 | 206. 9 | 3. 9 |
| 11–60 | . 1 | 175. 9 | 2. 3 |
| 11-70 | 1 | 176. 7 | 3. 2 |
| AY4166 | 10 | 195. 1 | 4. 3 |
| グリベンクラミド | 0. 1 | 177.8 | 3. 3 |

| | 第4表(3) | (5mmo1/L グル | コース存在下) |
|----------|-----------------------|-------------|-------------|
| 化合物番号 | 薬物濃度 | インスリン | /分泌量(ng/ml) |
| | $(\mu \text{ mol/L})$ | avg | se |
| なし | et-man | 51. 2 | 11. 3 |
| 7-640 | 10 | 138 | 4. 3 |
| 7-1290 | 10 | 88. 5 | 2.8 |
| 7-1398 | 10 | 118. 2 | 5. 9 |
| AY-4166 | 10 | 170.8 | 4. 2 |
| グリベンクラミド | 0. 1 | 156. 8 | 8. 4 |

第4表により本発明化合物はインスリン分泌活性を有することが示された。また、第4表に示されるようにこれら化合物は低濃度のグルコース(5 mmol/L)下では、10 倍濃い濃度でも顕著な分泌促進活性はなかった。一方、比較対照として用いたグリベンクラミド(ファーマコセラピィ、5 巻、43 頁、1985 年)およびAY-4166(薬理と臨床、7 巻、121 頁、1997 年)は低濃度グルコース下でも顕著な分泌促進活性を有した。

試験例2:正常ラットグルコース負荷後の血糖上昇抑制作用

Wistar 系雄性ラット (体重約 280 g) を 24 時間絶食した後、実験に供した。試験化合物を経口投与し、30 分後にグルコース (2g/kg) を経口投与した。採血は、



試験化合物投与前、グルコース負荷後 30、60、120、180 分目に尾静脈より行い、 血中グルコース濃度を簡易血糖測定装置で測定した。

結果を第5表に示す。

| ・おり女 単級中ンルューク優及 (Mg/a | 第5表 | 血漿中グルコース濃度 | (mg/dL |
|-----------------------|-----|------------|--------|
|-----------------------|-----|------------|--------|

| 化合物 | 投与量 | n | 0分 | 30 分 | 60 分 |
|--------|--------------|---|--------------|-----------------|-----------------|
| | (mg/kg, po) | | | | |
| コントロール | - | 6 | 65±3.0 | 135±7.9 | 145±7.8 |
| 7-640 | 30 | 6 | 68 ± 2.4 | $121 \pm 5.2 *$ | $121 \pm 5.9 *$ |
| 7-1398 | 30 | 6 | 65±2.3 | $112 \pm 6.3 *$ | $109 \pm 4.9 *$ |
| 7-1290 | 30 | 6 | 69±2.9 | $112 \pm 6.2 *$ | 107±5.5* |

| 化合物 | 投与量 | n | 120 分 | 180 分 | ······································ |
|--------|------------|-----|--------------|--------------|--|
| | (mg/kg, po | o) | | | |
| コントロール | - | 6 | 83±2.4 | 73±2.5 | |
| 7-640 | 30 | 6 | 97 ± 2.6 | 77 ± 3.1 | |
| 7-1398 | 30 | . 6 | 98 ± 3.9 | 79 ± 4.1 | |
| 7-1290 | 30 | 6 | 93±1.5 | 79±3.5 | |

有意差; *P<0.05 (Student's t-test or Aspin-Welch test) いずれの化合物も3塩酸塩として試験に供した。

第5表から明らかなように、本発明化合物はグルコース負荷後 30~60 分目に血糖上昇抑制作用を示した。一方、グルコース負荷後 120~180 分目では血糖降下作用は認められなかった。

化合物 (I) またはその薬理学的に許容される塩は、培養 β 細胞においてインスリン分泌促進作用を示し、ラットにおいて血糖降下作用を示すことから、糖尿病の予防および/または治療のための医薬の有効成分として有用である。また、糖尿病の各種合併症、例えば、網膜症、腎症、または神経症等の予防および/または治療のための医薬の有効成分として有用である。これらの医薬の有効成分としては、化合物 (I) およびその薬理学的に許容される塩、並びにそれらの水和物およびそれらの溶媒和物からなる群から選ばれる 1 種または 2 種以上の物質を用いることができる。上記物質は単独で投与することも可能であるが、通常は、有効成分である上記の物質と 1 種または 2 種以上の製剤用添加物とを含む医薬用組成物の形態で提供されることが望ましい。これらの医薬は、ヒトおよびそれ以外の

哺乳類動物に投与することができる。

医薬用組成物の形態は特に限定されず、経口投与または非経口投与用の製剤形態の中から治療や予防の目的に最も適した適宜の形態のものを選択することが可能である。経口投与に適した製剤形態としては、例えば、錠剤等を挙げることができ、非経口投与に適する製剤形態としては、例えば、注射剤等を挙げることができるが、これらに限定されることはない。

錠剤等の固体製剤の製造には、乳糖、マンニット等の賦形剤、でんぷん等の崩壊剤、ステアリン酸マグネシウム等の滑沢剤、ヒドロキシプロピルセルロース等の結合剤、脂肪酸エステル等の界面活性剤、グリセリン等の可塑剤等を用いることができる。

非経口投与に適当な注射用製剤は、好ましくは、受容者の血液と等張な滅菌水性媒体に有効成分である上記の物質を溶解または懸濁状態で含んでいる。例えば、注射剤の場合、塩溶液、ブドウ糖溶液、塩水とブドウ糖溶液との混合物からなる水性媒体等を用いて溶液を調製することができる。これらの非経口投与用製剤には、グリコール類、油類、フレーバー類、防腐剤、賦形剤、崩壊剤、滑沢剤、結合剤、界面活性剤、可塑剤等から選択される1種または2種以上の補助成分を添加することもできる。

化合物(I)の投与量および投与回数は、疾患の種類や重篤度、投与形態、患者の年齢や体重等の条件、合併症の有無等の種々の要因により適宜増減することが望ましいが、一般的には、成人 1 日当り 1~1000 mg/kg を 3~4 回に分けて投与することが好ましい。

発明を実施するための最良の形態

以下、本発明を実施例によりさらに具体的に説明するが、本発明の範囲はこれらの実施例に限定されることはない。なお、以下の実施例における化合物の番号は上記(a)~(m)に好ましい化合物として例示した化合物の番号に対応させてある)。

下記実施例および参考例中の各化合物の物理化学データは、以下の機器類によって測定した。

¹H-NMR: JEOL JNM-EX270 (270 MHz)または、JEOL JNM-GX270 (270 MHz)

MS: Micromass LCT または Micromass Quatro (APCI 法または ESI 法で測定)

実施例1





工程1:化合物(VIII)の合成

参考例 6~参考例 9 により得られた化合物(VI) (0.5 mL, 0.1 mol/L クロロホル ム懸濁溶液, 0.05 mmol) および 1-ヒドロキシベンゾトリアゾール (0.2 mL, 0.25 mol/L クロロホルム/テトラヒドロフラン=3/1 混合溶液, 0.05 mmol) に、R3R4N 部 分に相当する一級または二級アミン〔化合物 (VII) 〕 (0.065 mL, 1 mol/L クロ ロホルム溶液, 0.065 mmol) を加えた。続いて N-エチル-N'-(3-ジメチルアミノ プロピル)カルボジイミド ポリマーバウンド (70 mg, 0.1 mmol) を加え、55℃で 一晩攪拌した。得られた反応溶液を濾過し濃縮した。この際必要に応じてメタ ノールまたはテトラヒドロフランを加え沈殿を溶解してから濾過を行った。得ら れた残渣にエタノール (0.6 mL) およびバイオラッド*AG1-X8 OH型レジン (90 mg, 0.18 mmo1) を加え、70℃で 2 時間攪拌した。溶液を除去することにより得られる レジンをメタノール(0.3 ml × 3)で洗浄した。得られたレジンをクロロホルム/ メタノール混合溶液(0.5 mL, 1/1)に懸濁させ、4 mol/L 塩化水素酢酸エチル溶液 (0.1 mL)を加え、室温で 2 時間攪拌した。得られた反応溶液を濾過し濃縮した。 得られた残渣をクロロホルム(0.5 mL)に溶解し、4-ポリビニルピリジン(23 mg, 0.22 mmol)、またはバイオラッド®AG1-X8 OH型レジン (90 mg, 0.18 mmol) を加 え、室温で一晩攪拌した。反応溶液を濾過し濃縮することにより、化合物(VIII) を得た。

工程2:化合物(I-A)の合成

工程1で得られた化合物 (VIII) をテトラヒドロフラン (0.2 mL) に溶解した。この溶液にトリフェニルホスフィン (0.08 mL, 1 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 0.08 mmol) および R⁵ 部分に相当するアルコール [化合物 (IX)] (0.08 mL, 1 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 0.08 mmol) を加え、続いてアゾジカルボン酸ジエチル (0.08 mL, 1 mol/L テトラヒドロフラン溶液, 0.08 mmol) を加え、室温で一晩攪拌した。得られた反応溶液をバリアン社製ボンデシル SCX (BONDESIL SCX)カラムに通筒した後、クロロホルム/メタノール混合溶媒 (50% v/v, 2.2 mL) にて夾雑物を溶出した。続いて 2 mol/L アンモニアメタノール溶液 (1.6 mL) で目的化合物を溶出し、得られた溶液を濃縮することにより、化合物 (I-A) を通算収率

30-40%で得た。

得られた化合物は質量分析により同定した。各化合物の構造および分析結果は 上記(a)~(e)に記載した通りである。

なお、以下に代表的化合物のプロトン核磁気共鳴スペクトルを示した。

化合物 1-447

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm) (代表的ピーク): 0.94 (t, J = 7.4 Hz, 3 H), 1.6-1.8 (m, 2 H), 2.5-3.1 (m, 4 H), 3.5-3.7 (m, 6 H), 4.4-4.6 (m, 1 H), 7.1-7.3 (m, 10 H).

化合物 1-1259

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.95 (d, J = 6.1 Hz, 3 H), 1.5-1.7 (m, 5 H), 2.8-2.95 (m, 2 H), 3.25-3.35 (m, 2 H), 3.7-3.85 (m, 2 H), 3.85-4.0 (m, 2 H), 5.1-5.25 (m, 1 H), 5.25-5.45 (m, 2 H), 7.2-7.4 (m, 9 H), 7.4-7.5 (br d, 1 H).

化合物 1-1279

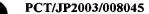
¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.96 (d, J = 6.3 Hz, 3 H), 1.5-1.75 (m, 8 H), 1.68 (s, 3 H), 1.75 (s, 3 H), 2.1-2.2 (br s, 4 H), 3.1-3.25 (m, 2 H), 3.4-3.55 (m, 2 H), 4.0-4.2 (m, 3 H), 4.4-4.5 (m, 2 H), 4.8-4.95 (m, 1 H), 4.95-5.1 (m, 1 H), 5.1-5.2 (m, 1 H), 7.2-7.4 (m, 5 H), 7.78 (s, 1 H).

化合物 2-1

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.93 (d, J = 6.6 Hz, 3 H), 0.94 (d, J = 6.6 Hz, 6 H), 1.1-1.25 (m, 1 H), 1.25-1.4 (m, 1 H), 1.4-1.5 (m, 4 H), 1.5-1.7 (m, 2 H), 1.60 (s, 3 H), 1.67 (s, 3 H), 1.9-2.05 (m, 2 H), 2.82 (dd, J = 7.1, 13.7 Hz, 1 H), 3.02 (dd, J = 6.7, 13.7 Hz, 1 H), 3.25-3.55 (m, 2 H), 3.6-3.8 (m, 3 H), 3.90 (t, J = 10.8 Hz, 1 H), 4.45-4.6 (m, 1 H), 5.0-5.1 (m, 1 H), 7.15-7.35 (m, 5 H), 8.0 (br d, 1 H), 9.20 (br s, 1 H).

化合物 2-41

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.3-0.4 (m, 2 H), 0.55-0.65 (m, 2 H), 1.05-1.2 (m, 1 H), 1.45-1.7 (m, 10 H), 1.8-2.0 (m, 2 H), 2.85 (dd, J = 6.6, 13.6 Hz, 1 H), 2.98 (dd, J = 7.1, 13.6 Hz, 1 H), 3.5-3.7 (m, 3 H), 3.85-4.0 (m, 1 H),



4.0-4.15 (m, 1 H), 4.45-4.6 (m, 1 H), 7.15-7.35 (m, 5 H), 7.98 (s, 1 H), 9.2-9.35 (m, 1 H).

化合物 2-42

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1. 45-1. 65 (m, 10 H), 1. 75 (s, 6 H), 1. 8-2. 0 (m, 2 H), 2. 84 (dd, J = 6.6, 13. 5 Hz, 1 H), 2. 96 (dd, J = 6.6, 13. 5 Hz, 1 H), 3. 55-3. 7 (m, 1 H), 3. 85-3. 95 (m, 1 H), 4. 0-4. 15 (m, 1 H), 4. 28 (d, J = 7.3 Hz, 2 H), 4. 45-4. 6 (m, 1 H), 5. 15-5. 25 (m, 1 H), 7. 2-7. 35 (m, 5 H), 7. 88 (s, 1 H), 9. 26 (br d, J = 7.3 Hz, 1 H).

化合物 2-45

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1.35-1.7 (m, 10 H), 1.75-2.0 (m, 4 H), 2.5-2.65 (m, 1 H), 2.80 (dd, J = 6.6, 13.5 Hz, 1 H), 2.91 (dd, J = 7.1, 13.5 Hz, 1 H), 3.46 (dd, J = 5.3, 8.9 Hz, 1 H), 3.55-3.75 (m, 5 H), 3.8-3.9 (m, 2 H), 3.95-4.05 (m, 1 H), 4.4-4.55 (m, 1 H), 7.1-7.3 (m, 5 H), 7.85 (br d, 1 H), 9.19 (d, J = 7.9 Hz, 1 H).

化合物 3-91

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.96 (d, $\mathcal{J} = 6.8$ Hz, 3 H), 1.02 (d, $\mathcal{J} = 6.8$ Hz, 3 H), 1.2-1.4 (m, 2 H), 2.0-2.15 (m, 10 H), 2.15-2.35 (m, 2 H), 2.35-2.5 (m, 2 H), 2.5-2.6 (m, 4 H), 3.5-3.7 (m, 3 H), 3.8-4.2 (m, 3 H), 4.55-4.65 (m, 2 H), 7.86 (s, 1 H), 9.41 (s, 1 H).

化合物 3-193

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.8-1.0 (m, 8 H), 1.1-1.35 (m, 4 H), 1.6-1.8 (m, 8 H), 1.8-2.0 (m, 1 H), 2.55-2.7 (m, 1 H), 2.8-3.1 (m, 2 H), 3.45-3.7 (m, 2 H), 3.8-4.0 (m, 1 H), 5.45-5.6 (m, 1 H), 7.2-7.4 (m, 4 H), 7.9-8.0 (m, 1 H), 9.7-9.8 (m, 1 H).

化合物 3-194

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.8-0.95 (m, 6 H), 1.2-1.45 (m, 3 H), 1.65-1.8 (m, 4 H), 2.0-2.15 (m, 4 H), 2.55-2.7 (m, 1 H), 2.8-3.1 (m, 2 H), 3.5-3.75 (m, 2 H), 3.8-4.0 (m, 1 H), 5.45-5.6 (m, 1 H), 5.6-5.75 (m, 2 H), 7.2-7.4 (m, 4 H), 7.9-8.0 (m, 1 H), 9.7-9.8 (m, 1 H).

実施例 2

上記(f)~(k)に示した化合物は以下に示す方法で製造した。

工程1:化合物(XI)の合成

参考例 1~参考例 5 により得られた化合物 (X) (0.5 mL, 0.1 mol/L クロロホルム/テトラヒドロフラン=2/1 混合溶液, 0.05 mmol) および 1-ヒドロキシベンゾトリアゾール (0.2 mL, 0.25 mol/L クロロホルム/テトラヒドロフラン=2/1 混合溶液, 0.05 mmol) に、R³R⁴N 部分に相当する一級または二級アミン〔化合物 (VII)〕 (0.065 mL, 1 mol/L クロロホルム溶液, 0.065 mmol) を加えた。続いて ルエチルーN'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド ポリマーバウンド (70 mg, 0.1 mmol) を加え、室温で 24 時間攪拌した。得られた反応溶液を濾過し濃縮した。この際必要に応じてメタノールを加え沈殿を溶解してから濾過を行った。得られた残渣をクロロホルム (0.6 mL) に溶解し、4-ポリビニルピリジン(23 mg, 0.22 mmol)、ベンゾイルクロリド ポリマーバウンド(23 mg, 0.05 mmol)を加え室温で一晩攪拌した。反応溶液を濾過し濃縮することにより、化合物 (XI)を得た。

工程2:化合物(XII)の合成

工程1で得られた化合物(XI)をクロロホルム(0.2 mL)に溶解し、塩化チオニル (0.1 mL, 1 mol/L) クロロホルム溶液, (0.1 mmol) を加え、密閉し 60° Cで 6 時間 攪拌した。反応溶液を濃縮して得られた残渣に、クロロホルム(0.6 mL)および 4-ポリビニルピリジン(23 mg, 0.22 mmol)を加え、 65° Cで一晩攪拌した。得られた 反応溶液を濾過し濃縮することにより、化合物(XII)を得た。

工程3:化合物(I-B)の合成

工程 2 で得られた化合物(XII)をテトラヒドロフラン (0.2 mL) に溶解し、 R^6R^7N 部分に相当する一級または二級アミン [化合物(XIII)] (0.06 mL, 1 mol/L) ロロホルム溶液, 0.06 mmol を加え 70-75℃で 3 日間攪拌した。続いてクロロホルム (0.4 mL)、4-ポリビニルピリジン (23 mg, 0.22 mmol) およびベンゾイルクロライド ポリマーバウンド (23 mg, 0.05 mmol) を加え室温で一晩攪拌した。 沈殿を生じている場合にはメタノールを加え完全に溶解した後、反応溶液を濾過し濃縮することにより化合物 (I-B) を通算収率 50-60% で得た。

得られた化合物は質量分析により同定した。各化合物の構造および分析結果は上記(f)~(k)に記載した通りである。

なお、以下に代表的化合物のプロトン核磁気共鳴スペクトルを示した。 化合物 7-31

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.89 (t, $\mathcal{J} = 6.6$ Hz, 3 H), 1.2-1.4 (m, 7 H), 1.45-1.7 (m, 4 H), 1.75-1.95 (m, 2 H), 1.95-2.3 (m, 6 H), 2.8-3.4 (m, 5 H), 3.45-3.75 (m, 4 H), 4.55-4.7 (m, 2 H), 4.85-5.0 (m, 1 H), 7.15-7.4 (m, 5 H), 8.60 (br s, 1 H), 8.92 (br s, 1 H), 9.29 (br s, 1 H).

化合物 7-251

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.92 (d, $\mathcal{J}=6.2$ Hz, 6 H), 1.2-1.3 (m, 3 H), 1.3-1.7 (m, 5 H), 1.75-1.95 (m, 2 H), 1.95-2.3 (m, 6 H), 2.8-3.4 (m, 5 H), 3.45-3.75 (m, 4 H), 4.55-4.7 (m, 2 H), 4.8-5.0 (m, 1 H), 7.15-7.4 (m, 5 H), 8.58 (br s, 1 H), 8.92 (br s, 1 H), 9.29 (br s, 1 H).

化合物 7-258

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1. 2-1. 3 (m, 3 H), 1. 3-1. 4 (m, 1 H), 1. 45-1. 55 (m, 2 H), 1. 7-1. 9 (m, 4 H), 1. 9-2. 1 (m, 1 H), 2. 1-2. 3 (m, 2 H), 2. 9-3. 2 (m, 5 H), 3. 4-3. 75 (m, 4 H), 4. 4-4. 5 (m, 2 H), 4. 5-4. 7 (m, 2 H), 4. 8-5. 0 (m, 1 H), 7. 15-7. 35 (m, 8 H), 7. 41 (s, 1 H), 8. 87 (br s, 1 H), 9. 39 (br s, 1 H), 9. 55 (br s, 1 H).

化合物 7-713

 1 H-NMR (CDC1₃) δ (ppm): 1. 2-1. 3 (m, 3 H), 1. 3-1. 4 (m, 1 H), 1. 45-1. 55 (m, 2 H), 1. 65-2. 05 (m, 6 H), 2. 05-2. 3 (m, 4 H), 2. 45-2. 6 (m, 1 H), 2. 8-3. 25 (m, 3 H), 3. 5-3. 75 (m, 4 H), 4. 5-4. 7 (m, 2 H), 4. 8-5. 0 (m, 1 H), 5. 45-5. 6 (m, 1 H), 7. 1-7. 4 (m, 9 H), 8. 0-8. 2 (m, 1 H), 8. 85 (br s, 1 H), 9. 0-9. 2 (m, 1 H).

化合物 7-785

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1. 2-1. 3 (m, 3 H), 1. 3-1. 4 (m, 1 H), 1. 45-1. 55 (m, 2 H), 1. 7-1. 9 (m, 4 H), 1. 9-2. 1 (m, 1 H), 2. 1-2. 3 (m, 2 H), 2. 9-3. 2 (m, 3 H), 3. 5-3. 75 (m, 4 H), 4. 5-4. 7 (m, 4 H), 4. 85-5. 0 (m, 1 H), 6. 8-6. 9 (m, 2 H)



H), 7.15-7.35 (m, 6 H), 8.45-8.6 (m, 1 H), 8.80 (s, 1 H), 9.10 (br s, 1 H).

化合物 7-892

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1.2-1.45 (m, 6 H), 1.65-1.85 (m, 2 H), 2.15-2.35 (m, 2 H), 2.9-3.2 (m, 4 H), 3.25-3.45 (m, 1 H), 3.6-3.8 (m, 3 H), 4.55-4.75 (m, 4 H), 4.85-5.0 (m, 1 H), 7.15-7.35 (m, 6 H), 7.45-7.6 (m, 2 H), 7.63 (d, J = 7.6 Hz, 1 H), 8.75-8.9 (m, 2 H), 9.22 (br s, 1 H).

化合物 7-893

¹H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 1.2-1.3 (m, 3 H), 1.3-1.4 (m, 1 H), 1.5-1.6 (m, 2 H), 1.7-1.9 (m, 4 H), 1.95-2.1 (m, 1 H), 2.15-2.35 (m, 2 H), 2.9-3.25 (m, 3 H), 3.5-3.8 (m, 4 H), 4.55-4.75 (m, 4 H), 4.8-5.0 (m, 1 H), 7.15-7.35 (m, 6 H), 7.4-7.55 (m, 2 H), 7.62 (d, J = 7.6 Hz, 1 H), 8.82 (br s, 1 H), 8.95-9.1 (m, 1 H), 9.27 (br s, 1 H).

化合物 7-1454

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 2.8-2.9 (m, 1 H), 2.94 (t, J = 6.3 Hz, 2 H), 3.15-3.25 (m, 1 H), 3.55-3.65 (m, 2 H), 3.65-3.9 (m, 2 H), 3.89 (s, 3 H), 4.55-4.65 (m, 1 H), 4.75-4.85 (m, 2 H), 6.28 (br s, 1 H), 6.34 (br s, 1 H), 6.9-7.0 (m, 3 H), 7.15-7.35 (m, 7 H), 8.33 (s, 1 H), 8.68 (br s, 1 H). 化合物 11-60

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.8-0.95 (m, 6 H), 2.3-2.4 (m, 1 H), 2.33 (s, 3 H), 2.85-2.95 (m, 4 H), 3.5-3.75 (m, 6 H), 3.95-4.1 (m, 1 H), 6.8-7.3 (m, 8 H), 8.85 (s, 1 H)

化合物 11-70

上記(1)~(m)に示した化合物は、以下に示す方法で製造した。

工程1:化合物 (XVI) の合成

参考例 10 または参考例 11 で得られた化合物 (XV) (0.1 mol/L クロロホルム溶液、0.50 mL、0.050 mmol)に、R³R⁴NHで表される化合物 (VII) (1 mmol/L クロロホルム溶液、0.065 mL、0.065 mmol)、1-ヒドロキシベングトリアゾール (0.20 mL, 0.25 mol/L クロロホルム/テトラヒドロフラン=3/1 混合溶液, 0.050 mmol) および ルエチルーN'-(3-ジメチルアミノプロピル)カルボジイミド ポリマーバウンド (70 mg, 0.1 mmol) を加え、50~55℃で 20 時間攪拌した。反応混合物中のレジンを濾別し、レジンをクロロホルム (1.8 mL) で洗浄後、有機層を全て合わせ、溶媒を留去した。残渣をクロロホルム (0.60 mL) に溶解し、ポリビニルピリジン(23 mg, 0.22 mmol)およびベングイルクロリド ポリマーバウンド (23 mg, 0.05 mmol)を加え、室温で 1 日間攪拌した。反応混合物中のレジンを濾別し、レジンをクロロホルム/メタノール混合溶媒 (3:1、1.8 mL) で洗浄後、有機層を全て合わせ、溶媒留去して目的物 (XVI) を得た。

工程2:化合物(XVII)の合成

工程1で得られた化合物(XVI)全量をクロロホルム(0.50 mL)に溶解し、塩化チオニル(0.005 mL)を加え、室温で終夜撹拌した。反応の終了を薄層クロマトグラフィーで確認した後、溶媒を留去して目的物(XVII)を得た。

工程3:化合物(I-C)の合成

工程 2 で得られた化合物(XVII)全量をクロロホルム(0.50 mL)に溶解し、(シアノメチレン)トリフェニルホスホラン(1 mmol/L トルエン溶液、0.10 mL、0.10 mmol)および R^{6a}R^{7a}NH で表される化合物(XIIIa)(1 mol/L クロロホルム溶液、0.10 mL、0.10 mmol)を加え、50℃で終夜撹拌した。反応の終了を薄層クロマトグラフィーで確認した後、溶媒を留去した。残渣をクロロホルム(0.70 mL)に溶解し、ポリビニルピリジン(23 mg, 0.22 mmol)およびベンゾイルクロリドポリマーバウンド(23 mg, 0.05 mmol)を加え、密閉し室温で 1 日間攪拌した。反応混合物中のレジンを濾別し、レジンをクロロホルム/メタノール混合溶媒(3:1、1.8 mL)で洗浄後、有機層を全て合わせ、溶媒留去して目的物(I-C)を得た。

得られた化合物は質量分析により同定した。各化合物の構造および分析結果は 上記(1)~(m)に記した通りである。

参考例1



(*S*)-4-(1-ヒドロキシメチル-2-フェニルエチルアミノ)-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸

4-クロロ-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸エチル(25.0 g, 107 mmol)のテトラヒドロフラン(100 mL)溶液に、氷冷下トリエチルアミン(29.9 mL, 215 mmol)を加え、続いて(が)-(-)-2-アミノ-3-フェニル-1-プロパノール(16.6 g, 110 mmol)のテトラヒドロフラン(150 mL)溶液を加えた。反応溶液を室温で一晩攪拌した。反応溶液を水(1000 mL)にあけ、攪拌することにより析出する結晶を濾取し、減圧下乾燥することにより、表題化合物のエチルエステル(37.8 g, 定量的)を得た。

このエチルエステル(30.0 g, 86.4 mmol)を、エタノール (300 mL)とテトラヒドロフラン(150 mL)の混合溶媒に溶解し、水酸化ナトリウム水溶液(2 mol/L, 100 mL)を加え、室温で 2 時間攪拌した。溶媒を減圧下留去して得られる残渣を水に溶解し、2 mol/L 塩酸で pH5 に調整した。析出した結晶を濾取し、減圧下乾燥することにより、表題化合物(27.9 g, 定量的)を得た。

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ (ppm): 2.49 (s, 3 H), 2.85-2.95 (m, 2 H), 3.45-3.55 (m, 2 H), 4.4-4.55 (m, 1 H), 4.85-5.05 (m, 1 H), 7.1-7.3 (m, 5 H), 8.49 (s, 1 H), 8.64 (d, J = 8.3 Hz, 1 H).

IR(KBr 錠): 1658, 1583, 1495, 1373, 1284, 1271, 1176 cm⁻¹

融点(H₂0) 162-164 ℃

APCI-MS m/z 320 ([M+H] $^{+}$).

元素分析 Calcd. for $C_{15}H_{17}N_3O_3S$ 0.5 H_2O : C, 54.86; H, 5.52; N, 12.80. Found: C, 54.89; H, 5.44; N, 12.73.

本化合物の対掌体(R体)は、対応する R体のアミンを用い同様の方法により合成 した。なお、分析データは完全に一致した。

以下の、参考例 2 から 5 では、(S)-(-)-2-Tミノ-3-Tェニル-1-Tロパノールに代えて対応するアミンを用い、参考例 1 とほぼ同様の方法により目的化合物を得た。

参考例2

(5)-4-(2-シクロヘキシル-1-ヒドロキシメチルエチルアミノ)-2-メチルチオピリ

ミジン-5-カルボン酸

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ (ppm): 0.8-1.05 (m, 2 H), 1.05-1.35 (m, 4 H), 1.35-1.55 (m, 2 H), 1.55-1.75 (m, 4 H), 1.75-1.9 (m, 1 H), 2.46 (s, 3 H), 3.45-3.65 (m, 2 H), 4.3-4.5 (m, 1 H), 4.7-4.9 (m, 1 H), 8.44 (d, J = 8.2 Hz, 1 H), 8.50 (s, 1H).

IR(KBr 錠): 1683, 1581, 1383, 1172 cm⁻¹

融点(H₂O) 170-173 ℃

APCI-MS m/z 326 ([M+H]⁺).

元素分析 Calcd. for $C_{15}H_{23}N_3O_3S$ 0.3 H_2O : C, 54.46; H, 7.19; N, 12.70. Found: C, 54.55; H, 6.99; N, 12.64.

参考例3

4-[1-ヒドロキシメチル-2-(4-メトキシフェニル)エチルアミノ]-2-メチルチオピ リミジン-5-カルボン酸

 1 H-NMR (DMSO- d_{6}) δ (ppm): 2.48 (s, 3 H), 2.75-2.85 (m, 2 H), 3.4-3.5 (m, 2 H), 3.71 (s, 3 H), 4.3-4.45 (m, 1 H), 5.02 (br s, 1 H), 6.83 (d, J = 8.6 Hz, 2 H), 7.15 (d, J = 8.6 Hz, 2 H), 8.49 (s, 1 H), 8.59 (d, J = 8.2 Hz, 1 H).

IR(KBr 錠): 1606, 1576, 1512, 1379, 1248, 1198 cm⁻¹

融点(H₂O-CH₃OH) 165-167 ℃

APCI-MS m/z 350 ([M+H]⁺).

元素分析 Calcd. for $C_{16}H_{19}N_3O_4S$ 2.4 H_2O : C, 48.94; H, 6.11; N, 10.70. Found: C, 48.88; H, 5.61; N, 10.70.

参考例4

4-(2-ヒドロキシ-1, 1-ジメチルエチルアミノ)-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸

 1 H-NMR (DMSO- d_{6}) δ (ppm): 1.44 (s, 6 H), 2.50 (s, 3 H), 3.62 (s, 2 H), 4.88 (br s, 1 H), 8.51 (s, 1 H), 8.70 (s, 1 H).

IR(KBr 錠): 1653, 1628, 1596, 1576, 1296, 1173 cm⁻¹

融点(H,0) 227-229 ℃

APCI-MS m/z 258 ([M+H]⁺).

元素分析 Calcd. for $C_{10}H_{15}N_3O_3S$ 0.5 H_2O : C, 45.10; H, 6.06; N, 15.78. Found: C, 45.08; H, 5.85; N, 15.58.

参考例5

(R)-4-(1-ヒドロキシメチル-2-メチルプロピルアミノ)-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸

 1 H-NMR (CDCl₃) δ (ppm): 0.85-1.05 (m, 6 H), 1.9-2.1 (m, 1 H), 2.54 (s, 3 H), 3.7-3.8 (m, 1 H), 3.9-4.0 (m, 1 H), 4.05-4.2 (m, 1 H), 8.78 (br s, 1 H), 9.28 (br s, 1 H).

IR(KBr 錠): 1693, 1604, 1597, 1390, 1281, 1174 cm⁻¹

融点(CH₃OH) 123-125 ℃

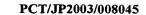
APCI-MS m/z 272 ([M+H]⁺).

元素分析 Calcd. for $C_{11}H_{17}N_3O_3S$ 2.3 H_2O : C, 42.24; H, 6.96; N, 13.43. Found: C, 42.10; H, 5.74; N, 13.27.

参考例6

(S)-2-ベンジル-5-オキソ-2, 3, 5, 6-テトラヒドロイミダゾ[1, 2-c] ピリミジン-8-カルボン酸

参考例 1 の前半部分に従って得た (S)-4-(1-ヒドロキシメチル-2-フェニルエチルアミノ)-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸のエチルエステル (27.4 g, 79.0 mmol)のクロロホルム (270 mL)溶液に塩化チオニル (17.3 mL, 237 mmol)を加え、7.5 時間加熱還流した。得られた反応溶液を減圧下濃縮した。得られた残渣にクロロホルム (220 mL)、水 (60 mL)および炭酸カリウム (43.7 g, 316 mmol)を加え、24 時間加熱還流した。得られた反応溶液のクロロホルム層を分離し、減圧下濃縮した。得られた残渣に反応溶液から分離された水層、エタノール (200 mL)および炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 20 時間加熱還流した。さらに反応溶液に炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 5 時間加熱還流した。待られた反応溶液に炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 5 時間加熱還流した。得られた反応溶液に炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 5 時間加熱還流した。得られた反応溶液に炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 5 時間加熱還流した。得られた反応溶液に炭酸カリウム (10.9 g, 79.0 mmol)を加え 5 時間加熱還流した。得られた反応溶液を減圧下濃縮し、得られた残渣を水に溶解し、クロロホルムで洗浄した。水層を pH5 に調整することにより析出する結晶を濾取し、減圧下乾燥することにより、表題化合物 (18.8 g, 通算収率 88%)を得た。



¹H-NMR (DMSO-d₆) δ (ppm): 2.93 (dd, J = 7.9, 13.5 Hz, 1 H), 3.10 (dd, J = 4.3, 13.5 Hz, 1 H), 3.77 (dd, J = 6.3, 12.2 Hz, 1 H), 3.96 (dd, J = 10.3, 12.2 Hz, 1 H), 4.4-4.5 (m, 1 H), 7.2-7.4 (m, 5 H), 8.40 (s, 1 H).

本化合物の対掌体(R体)は、対応する R体のアミンを用いて参考例 1 の前半部分 に従って得たエチルエステルを原料として、同様の方法により合成した。なお、 分析データは完全に一致した。

以下の、参考例 7 から 9 では、(s)-4-(1-ヒドロキシメチル-2-フェニルエチルアミノ)-2-メチルチオピリミジン-5-カルボン酸のエチルエステルに代えて対応するエステルを用い、参考例 6 とほぼ同様の方法により目的化合物を得た。

参考例7 - -

(S)-2-イソプロピル-5-オキソ-2, 3, 5, 6-テトラヒドロイミダゾ[1, 2-c] ピリミジン-8-カルボン酸

¹H-NMR (DMSO-d₆) δ (ppm): 0.89 (d, J = 6.9 Hz, 3 H), 0.94 (d, J = 6.9 Hz, 3 H), 1.95-2.1 (m, 1 H), 3.81 (dd, J = 11.9, 17.2 Hz, 1 H), 4.0-4.15 (m, 2 H), 8.47 (s, 1 H).

参考例8

(S)-2-(シクロヘキシルメチル)-5-オキソ-2, 3, 5, 6-テトラヒドロイミダゾ[1, 2-c] ピリミジン-8-カルボン酸

 1 H-NMR (DMSO- d_{6}) δ (ppm): 0.85-1.05 (m, 2 H), 1.1-1.3 (m, 3 H), 1.3-1.55 (m, 2 H), 1.55-1.8 (m, 6 H), 3.55-3.75 (m, 1 H), 4.1-4.3 (m, 2 H), 8.45 (s, 1 H).

参考例 9

2,2-ジメチル-5-オキソ-2,3,5,6-テトラヒドロイミダゾ[1,2-c]ピリミジン-8-カルボン酸

 1 H-NMR (DMSO- 1 d₆) δ (ppm): 1.42 (s, 6 H), 3.79 (s, 2 H), 8.45 (s, 1 H). 参考例 10

(S)-6-クロロ-2-(1-ヒドロキシメチル-2-フェニルエチルアミノ)ニコチン酸 市販の 2,6-ジクロロニコチン酸 (30.0 g, 156 mmol) をジオキサン (500 mL) に溶解し、(S)-(-)-2-アミノ-3-フェニル-1-プロパノール (35.43 g, 234 mmol,



1.5 当量)およびトリエチルアミン (65.3 mL, 469 mmol) を加え、加熱還流下、3 日間撹拌した。反応混合物に水を加えクロロホルムで抽出し、得られた有機層を水洗後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒留去後の残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (クロロホルム/メタノール/酢酸=10/1/0.1 で溶出) で精製し、黄色結晶の表題化合物 (28.1 g, 91.6 mmol, 収率 59%) を得た。

 1 H-NMR (DMSO-d₆) δ (ppm): 2.82 (m, 2 H), 3.2-3.7 (2 H, 他のピークと重複), 4.14 (m, 1 H), 4.41 (br s, 1 H), 6.44 (d, J = 7.8 Hz, 1 H), 7.1-7.4 (m, 5 H), 8.06 (d, J = 7.9 Hz, 1 H), 9.38 (br s, 1 H).

参考例 11

(*R*)-6-クロロ-2-(1-ヒドロキシメチル-2-フェニルエチルアミノ)ニコチン酸 市販の 2,6-ジクロロニコチン酸 (30.0 g, 156 mmol) をジオキサン (500 mL) に溶解し、(*R*)-(+)-2-アミノ-3-フェニル-1-プロパノール (35.43 g, 234 mmol, 1.5 当量) およびトリエチルアミン (65.3 mL, 469 mmol) を加え、加熱還流下、6日間撹拌した。反応混合物に水を加えクロロホルムで抽出し、得られた有機層を水洗後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。溶媒留去後、*m*-ヘキサンー酢酸エチル (3:1) を加え、再度溶媒を留去し、黄色結晶の表題化合物 (35.8 g, 117 mmol, 収率 75%) を得た。

 1 H-NMR (DMSO- d_{6}) δ (ppm): 2.86 (m, 2 H), 3.1-3.6 (2 H, 他のピークと重複), 4.24 (m, 1 H), 5.0 (br s, 1 H), 6.59 (d, J = 8.1 Hz, 1 H), 7.1-7.3 (m, 5 H), 8.02 (d, J = 8.1 Hz, 1 H), 10.45 (d, J = 7.9 Hz, 1 H).

産業上の利用可能性

本発明により、グルコース濃度依存的なインスリン分泌促進作用または血糖降下作用を有し、糖尿病治療剤等に有用な二環性複素環化合物またはその薬理学的に許容される塩を提供することができる。

請求の範囲

1. 式(I)

$$R^{3} \xrightarrow[R^{4}]{N} (I)$$

【式中、X…Y…Z は R⁵N-C=O(式中、R⁵ は水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の医級アルケニルまたは置換もしくは非置換の低級アルキニルを表す)、N=C-NR⁶R¹ [式中、R⁶ および R¹ は同一または異なって、水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルキニル、置換もしくは非置換のアリールまたは置換もしくは非置換の複素環基を表すか、または R⁶ と R¹ が隣接する窒素原子と一緒になって

(式中、n は $1\sim3$ の整数を表し、W は $-CH_2$ -、-CH=CH-、-NH-、硫黄原子または酸素原子を表し、 R^8 および R^9 は同一または異なって水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換のアラルキル、置換もしくは非置換のアラルキル、置換もしくは非置換の低級アルコキシカルボニル、置換もしくは非置換の低級アルカノイル、置換もしくは非置換の下ロイル、置換もしくは非置換の不テロアロイル、ハロゲン、アミノ、ニトロ、シアノ、ヒドロキシ、オキソ、カルボキシ、カルバモイル、置換もしくは非置換のモノまたはジ低級アルキルアミノ、置換もしくは非置換の低級アルカノイルアミノ、置換もしくは非置換の低級アルコキシまたは置換の低級アルコキシ、置換もしくは非置換の下ラルキルオキシまたは置換もしくは非置換の低級アルカノイルオキシを表す)を表す]または $C=C-NR^{6a}R^{7a}$ (式中、 R^{6a} および R^{7a} はそれぞれ前記 R^{6} および R^{7} と同義である)を表し、 R^{1} および R^{2} は同一または異なって、水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、

置換もしくは非置換のアラルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換の低級アルキニル、置換もしくは非置換のアリール、置換もしくは非置換の複素環基、ハロゲン、カルボキシ、置換もしくは非置換の低級アルコキシカルボニルまたは C(=0)-NR^{6b}R^{7b} (式中、R^{6b} および R^{7b} はそれぞれ前記 R⁶ および R⁷ と同義である)を表し、R³ および R⁴ は同一または異なって水素原子、置換もしくは非置換の低級アルキル、置換もしくは非置換の低級アルケニル、置換もしくは非置換のアラルキルまたは置換もしくは非置換の複素環基を表すか、または R³ と R⁴ が隣接する窒素原子と一緒になって

(式中、na、W、R^{8a}および R^{9a}はそれぞれ前記 n、W、R⁸および R⁹と同義である)を表す}で表される化合物またはその薬理学的に許容される塩。

- 2. X···Y···Z が R⁵N-C=0 (式中、R⁵は前記と同義である) である請求の範囲 1 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 3. $X \cdots Y \cdots Z$ が $N=C-NR^6R^7$ (式中、 R^6 および R^7 はそれぞれ前記と同義である)である請求の範囲 1 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 4. R⁶および R⁷が同時に水素原子ではない請求の範囲 3 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 5. R^6 が水素原子であり、かつ R^7 が置換もしくは非置換のピロリジニルである 請求の範囲 3 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 6. X…Y…Z が C=C-NR^{6a}R^{7a} (式中、R^{6a}および R^{7a}はそれぞれ前記と同義である) である請求の範囲 1 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 7. R^{6a} および R^{7a} が同時に水素原子ではない請求の範囲 6 記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 8. R^1 および R^2 の一方が水素原子であり、他方が置換もしくは非置換の低級アルキルまたは置換もしくは非置換のアラルキルであるか、あるいは R^1 および R^2 が同一または異なって置換もしくは非置換の低級アルキルである請求の範囲 $1 \sim 7$ のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。

- 9. R^1 が水素原子であり、かつ R^2 がアラルキルである請求の範囲 $1 \sim 7$ のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 10. R³が水素原子であり、かつ R⁴が低級アルキルである請求の範囲1~9のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 11. R^3 が水素原子であり、かつ R^4 が置換もしくは非置換のアラルキルである 請求の範囲 $1 \sim 9$ のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩。
- 12. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩を含有することを特徴とする医薬。
- 13. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩を含有することを特徴とする糖尿病の予防および/または治療剤。
- 14. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩を含有することを特徴とする糖尿病合併症の予防および/または治療剤。
- 15. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩を含有することを特徴とするインスリン分泌促進剤。
- 16. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩を含有することを特徴とする血糖降下剤。
- 17. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする糖尿病の予防および/または治療方法。
- 18. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする糖尿病合併症の予防および/または治療方法。
- 19. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の有効量を投与することを特徴とするインスリン分泌促進方法。
- 20. 請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の有効量を投与することを特徴とする血糖降下方法。
- 21. 糖尿病の予防および/または治療剤を製造するための請求の範囲 1 ~ 1 1のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。

- 22. 糖尿病合併症の予防および/または治療剤を製造するための請求の範囲 $1\sim1$ 1 のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。
- 23. インスリン分泌促進剤を製造するための請求の範囲1~11のいずれかに記載の化合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。
- 24. 血糖降下剤を製造するための請求の範囲 1 ~ 1 1 のいずれかに記載の化 合物またはその薬理学的に許容される塩の使用。



rnational application No.
PCT/JP03/08045

| A CLASSIFICATION OF CHARLES | |
|--|---|
| A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER | |
| Int.Cl ⁷ C07D471/04, A61K31/437, 31 | 1/445, 31/4453, 31/4545, 31/496, |
| 31/519, 31/5377, 31/55, A6 | 51P3/10, 9/10, 13/12, 25/00, |
| 43/00, C07D487/04 | |
| According to International Patent Classification (IPC) or to both na | ational classification and IPC |
| B. FIELDS SEARCHED | |
| | |
| Minimum documentation searched (classification system followed | by classification symbols) |
| Int.Cl ⁷ C07D471/04, A61K31/437, 31 | ./445, 31/4453, 31/4545, 31/496, |
| 31/519, 31/5377, 31/55, co |)7D487/04 |
| | |
| | |
| Documentation searched other than minimum documentation to the | extent that such documents are included in the fields searched |
| | |
| | |
| | |
| Electronic data base consulted during the international search (nam | e of data base and, where practicable, search terms used) |
| CA(STN), REGISTRY(STN), WPIDS(STN) | |
| | |
| | |
| | |
| C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT | |
| Citation of document with indication above | |
| Category* Citation of document, with indication, where ap | propriate, of the relevant passages Relevant to claim No. |
| A WO 01/47931 A (Kyowa Hakko K | ogyo Co., Ltd.), 1-16,21-24 |
| 05 July, 2001 (05.07.01), | 0930 00.7 1100.77 |
| Full text | ŀ |
| | |
| & EP 1251130 A | |
| | |
| | |
| · · | |
| | |
| | |
| | |
| 8 | |
| | |
| | |
| • | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | |
| 1 | |
| | , |
| Further documents are listed in the continuation of Box C. | See patent family annex. |
| | Goe patent family annox. |
| * Special categories of cited documents: | "T" later document published after the international filing date or |
| "A" document defining the general state of the art which is not | priority date and not in conflict with the application but cited to |
| "E" considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing | understand the principle or theory underlying the invention |
| "E" earlier document but published on or after the international filing date | "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be |
| "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is | considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone |
| cited to establish the publication date of another citation or other | "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be |
| special reason (as specified) | considered to involve an inventive step when the document is |
| "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other | combined with one or more other such documents, such |
| means "P" document published prior to the international filing data but later | combination being obvious to a person skilled in the art |
| accomment provided prior to the international fifting date but later | "&" document member of the same patent family |
| than the priority date claimed | |
| Date of the actual completion of the international search | Date of mailing of the international search report |
| 28 July, 2003 (28.07.03) | 12 August, 2003 (12.08.03) |
| | • |
| | |
| Name and mailing address of the ISA/ | Authorized officer |
| Japanese Patent Office | |
| | |
| Facsimile No. | Telephone No. |

Box I Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet) This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons: 1. X Claims Nos.: 17-20 because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely: The inventions as set forth in claims 17 to 20 pertain to methods for treatment of the human body by therapy. Claims Nos.: because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically: Claims Nos.: because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a). Box II Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet) This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows: As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims. As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fee, this Authority did not invite payment of any additional fee. As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.: No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.: Remark on Protest The additional search fees were accompanied by the applicant's protest. No protest accompanied the payment of additional search fees.





国際出願番号 PCT/JP03/08045

| A. 発明の属する分野の分類(国際特許分類(IPC)) Int. Cl ⁷ C07D471/04, A61K31/43 31/496, 31/519, 31/5377 25/00, 43/00, C07D487/0 | , 31/55, A61P3/10, 9/10 | (4545,), 13/12, |
|---|--|---|
| B. 調査を行った分野 | | |
| 調査を行った最小限資料(国際特許分類(IPC)) | | |
| Int. Cl' C07D471/04, A61K31/43 31/496, 31/519, 31/5377 | 7, 31/445, 31/4453, 31/ , 31/55, C07D487/04 | 4545, |
| 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの | | |
| | | |
| 国際調査で使用した電子データベース(データベースの名称、 | | · |
| CA (STN), REGISTRY (STN), WPII | OS (STN) | |
| C. 関連すると認められる文献 | | |
| 引用文献の | | 関連する |
| カテゴリー* 引用文献名 及び一部の箇所が関連する | | 請求の範囲の番号 |
| A WO 01/47931 A (協和語 07.05, 文献全体 & EP | 毲酵工業株式会社) 2 0 0 1. 1 2 5 1 1 3 0 A | 1-16, 21-24 |
| | | |
| ・ C欄の続きにも文献が列挙されている。 | □ パテントファミリーに関する別 | 紙を参照。 |
| * 引用文献のカテゴリー 「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの 「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献(理由を付す) 「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願 | の日の後に公表された文献 「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献 「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献の理解と矛盾するものではなく、名の理解のために引用するもの 「X」特に関連のある文献であって、当の新規性又は進歩性がないと考え 「Y」特に関連のある文献であって、当上の文献との、当業者にとった。 よって進歩性がないと考えられる 「&」同一パテントファミリー文献 | 時の原理又は理論 対数文献のみで発明 られるもの 対数文献と他の1以 関である組合せに |
| 国際調査を完了した日 28.07.03 | 国際調査報告の発送日 | .08.0 3 |
| 国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 郵便番号100-8915 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号 | 特許庁審査官(権限のある職員) 内藤 伸一 電話番号 03-3581-1101 | 4P 8615 |





国際出願番号 PCT/JP03/08045

| 第Ⅰ欄 | |
|---------------|--|
| | - 請求の範囲の一部の調査ができないときの意見(第1ページの2の続き) |
| 成しなか | 条第3項(PCT17条(2)(a))の規定により、この国際調査報告は次の理由により請求の範囲の一部について作いった。 |
| 1. X | 請求の範囲 <u>17-20</u> は、この国際調査機関が調査をすることを要しない対象に係るものである。 つまり、 |
| | 請求の範囲17-20の発明は、治療による人体の処置方法に関するものである。 |
| 2. | 請求の範囲は、有意義な国際調査をすることができる程度まで所定の要件を満たしていない国際出願の部分に係るものである。つまり、 |
| 3. 🗌 | 請求の範囲 は、従属請求の範囲であってPCT規則6.4(a)の第2文及び第3文の規定に |
| | 従って記載されていない。 |
| 第Ⅱ欄 | 発明の単一性が欠如しているときの意見(第1ページの3の続き) |
| 次に対 | ☆べるようにこの国際出願に二以上の発明があるとこの国際調査機関は認めた。 |
| 711-10 | こののフィー・プログログに一クプログログランとこうプログスの日本のグランでの |
| | |
| | |
| | |
| | |
| | · |
| | |
| | |
| 1. 1 1 | Name of the second seco |
| ٠. ت | 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求 の範囲について作成した。 |
| 2. | 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求 の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追 加調査手数料の納付を求めなかった。 |
| | の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追 |
| 2. 3. | の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追 加調査手数料の納付を求めなかった。 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、手数料の納 付のあった次の請求の範囲のみについて作成した。 |
| 2. | の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、手数料の納 |
| 2. 3. | の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、手数料の納付のあった次の請求の範囲のみについて作成した。 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載 |
| 2. | の範囲について作成した。 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求の範囲について調査することができたので、追 加調査手数料の納付を求めなかった。 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、手数料の納 付のあった次の請求の範囲のみについて作成した。 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったので、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載 |